

PRISCILA SAVULSKI FERREIRA

CONVERGÊNCIA GLOBAL DE UM MÉTODO SEM
DERIVADAS PARA OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA

PRISCILA SAVULSKI FERREIRA

CONVERGÊNCIA GLOBAL DE UM MÉTODO SEM
DERIVADAS PARA OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientadora: Prof.^a Dr.^a Elizabeth Wegner Karas.

Coorientadora: Prof.^a Dr.^a Mael Sachine.

Curitiba
Fevereiro de 2012

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
PRISCILA SAVULSKI FERREIRA

CONVERGÊNCIA GLOBAL DE UM MÉTODO SEM
DERIVADAS PARA OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA

Prof.^a Dr.^a Elizabeth Wegner Karas
Orientadora - Universidade Federal do Paraná - UFPR

Prof.^a Dr.^a Mael Sachine
Coorientadora - Universidade Federal do Paraná - UFPR

Prof. Dr. Roberto Andreani
Universidade Estadual de Campinas - Unicamp

Prof. Dr. Orizon Pereira Ferreira
Universidade Federal de Goiás - UFG

Prof. Dr. Lucas Garcia Pedroso
Universidade Federal do Paraná - UFPR

Curitiba, 28 de fevereiro de 2012.

Agradecimentos

Meus sinceros agradecimentos:

Agradeço primeiramente aos meus pais Teófilo e Marli,
ao meu irmão Leandro e meu companheiro Caio,
que me apoiaram na minha caminhada.

Muito obrigada pelo apoio, compreensão, ajuda,
e, em especial, por todo carinho ao longo deste percurso.

Amo vocês.

Obrigada Caio por todos os dias que ficamos juntos estudando.

Aos meus familiares que tanto me apoiaram e me incentivaram.

Obrigada pelo carinho e amor.

Às minhas orientadoras Elizabeth e Mael que estavam
sempre dispostas a ajudar. Obrigada pelo tempo, esforço e
dedicação empregados nesta pesquisa.

Agradeço ao professor Ademir A. Ribeiro e ao colega Paulo Conejo
que tanto me ajudaram. Agradeço a este maravilhoso grupo
por todos os conhecimentos compartilhados e principalmente
a amizade. Vocês são um exemplo para mim.

Aos membros da banca, professores Roberto, Orizon e Lucas,
obrigada por aceitarem o convite.

Ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da
UFPR pela oportunidade e formação de qualidade propiciada.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e
Tecnológico, pelo apoio financeiro.

E finalmente, mas não menos importante, a Deus pela capacitação
concedida, pela força espiritual e por seguir ao meu lado.

“O universo é uma harmonia de contrários.”

Pitágoras

*Aos meus amores
Teófilo, Marli, Leandro e Caio, pois
sempre confiaram, acreditaram, me
apoiaram e me deram forças para se-
guir.*

Resumo

Apresenta-se um método para minimização irrestrita de uma função $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ duas vezes diferenciável cujas derivadas estão indisponíveis. Considera-se para tal, um algoritmo iterativo de região de confiança. Durante as iterações a função objetivo é aproximada por modelos quadráticos através de interpolações polinomiais. São considerados $n + 1$ pontos interpoladores, os quais definem unicamente um polinômio linear. Para se obter modelos quadráticos consideram-se Hessianas como quaisquer matrizes simétricas uniformemente limitadas. De uma iteração para outra, os conjuntos de pontos interpoladores sofrem alteração em no máximo um elemento. Além disso, a cada iteração a função objetivo é avaliada uma única vez. O método proposto possui dois tipos de iterações, região de confiança e alternativa. As do tipo de região de confiança têm como objetivo minimizar o modelo na esperança de que grande parte dessa redução seja herdada pela função objetivo. Já as alternativas visam melhorar a disposição dos pontos interpoladores. Apresenta-se este método de forma algorítmica. Prova-se que se o número de iterações é infinito, se a função objetivo é limitada inferiormente e possui derivadas segundas limitadas, então todo ponto de acumulação da sequência gerada pelo algoritmo é estacionário.

Palavras-chave: Método de região de confiança; teoria de convergência; otimização sem derivadas; minimização irrestrita.

Abstract

We present an unconstrained method for minimization of a function $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ twice differentiable whose derivatives are unavailable. For this we consider the iterative algorithm of trust region. During the iterations the objective function is approximated by models using polynomial interpolations with $n + 1$ points, which define only a linear polynomial. In the case of quadratic models, these are based on previous models, where the Hessian is symmetric, it is lower bounded and it is defined in an arbitrary manner. The sets of interpolation points from one iteration to another are changed in at most one element. In addition, at each iteration the objective function is calculated only once. The proposed method has two types of iterations, the trust region iteration and the alternative iteration. The trust region iteration aims to minimize the model in the hope that most of this reduction may be inherited by the objective function. The alternative iterations aims to improve the position of the interpolation points. We present this method in a well-defined algorithm. We prove that, if the objective function is bounded below, if the second derivatives is also bounded, and if the number of iterations is infinite, then every accumulation point of the sequence generated by the algorithm is a stationary point.

Palavras-chave: *Trust region methods; Convergence theory; Derivate free optimization; Unconstrained minimization.*

Sumário

| | |
|---|-----------|
| Introdução | 1 |
| 1 Revisão de Conceitos | 3 |
| 1.1 Conhecimentos básicos | 3 |
| 1.2 Envoltória convexa | 4 |
| 1.3 Funções quadráticas | 6 |
| 1.4 Método de região de confiança | 9 |
| 1.4.1 Algoritmo | 11 |
| 2 Descrição do Algoritmo | 12 |
| 2.1 Descrição geral | 12 |
| 2.1.1 Pontos interpoladores | 12 |
| 2.1.2 Sequência gerada | 13 |
| 2.1.3 Modelo interpolador | 14 |
| 2.1.4 Parâmetros | 14 |
| 2.2 Tentativa de região de confiança | 15 |
| 2.3 Tentativa alternativa | 18 |
| 2.3.1 Alternativa tipo <i>alpha</i> | 19 |
| 2.3.2 Alternativa tipo <i>beta</i> | 21 |
| 2.4 Exigências gerais | 24 |
| 2.5 Algoritmo e suas propriedades | 24 |
| 3 Propriedades do Conjunto Interpolador | 29 |
| 4 Convergência Global | 49 |
| 4.1 Convergência fraca | 49 |
| 4.1.1 Gradiente de F limitado em uma subsequência | 50 |
| 4.1.2 A sequência com cada raio é finita | 59 |
| 4.2 Convergência forte | 66 |
| Conclusão | 73 |
| Referências Bibliográficas | 74 |

Introdução

Em muitas aplicações industriais e de engenharia necessita-se resolver problemas de otimização em que as derivadas da função objetivo não estão disponíveis. Além disso, as avaliações da função objetivo são, geralmente, muito caras computacionalmente. Este problema motivou alguns pesquisadores a introduzir a minimização sem derivadas utilizando aproximações para a função objetivo, as quais podem ser calculadas por interpolação polinomial ou regressão, como os propostos em [6].

Conn, Scheinberg e Vicente foram atraídos pelo crescente número de aplicações e acreditam que este campo é muito útil e desafiador. Ressaltam, em [7], que a ausência de derivadas computáveis naturalmente proíbem o uso de modelos de Taylor, tão comuns em otimização com derivadas. Além disso, consideram o contexto sem derivadas mais difícil, uma vez que tenta-se alcançar a minimização com consideravelmente menos informações.

O propósito deste trabalho é analisar o problema de otimização sem derivadas de forma teórica a fim de provar a convergência do método proposto por Powell em [17]. Neste, estuda-se um método de minimização irrestrita que não utiliza as derivadas da função objetivo e também evita o excesso de avaliações na função objetivo. Mais formalmente, resolve-se o problema

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & F(x) \\ \text{sujeito a} & x \in \mathbb{R}^n, \end{array}$$

onde a função objetivo $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é duas vezes diferenciável. Exige-se a diferenciabilidade de F para fins teóricos. O método proposto por Powell [17] se baseia nos métodos de região de confiança [3]. De modo geral, tais métodos utilizam uma aproximação quadrática da função objetivo para obter uma redução significativa dentro de um certo conjunto fechado. Geralmente este polinômio quadrático é obtido por uma aproximação por Taylor [10], utilizando assim derivadas. Como a abordagem discutida neste trabalho não utiliza derivadas, os modelos são construídos através de uma interpolação polinomial quadrática [13].

Os algoritmos UOBYQA, BOBYQA e NEWUOA propostos por Powell e descritos em [14], [15] e [16], respectivamente, apresentam técnicas que funcionam muito bem na prática. No entanto, não fornecem os suportes necessários para a prova da convergência. Em [17] foi proposta uma simplificação destes algoritmos para a obtenção da convergência global. Pressupõe-se para tal que o número de iterações é infinito, que os cálculos são exatos e que não existem erros computacionais.

A convergência de algoritmos para otimização sem derivadas recebe também muita atenção nas obras de Conn, Scheinberg e Vicente [4, 5, 7]. Eles desenvolveram a maior parte da teoria publicada de métodos sem derivadas que utilizam os métodos de região de confiança utilizando uma aproximação linear ou quadrática para F em cada iteração.

Uma das grandes diferenças entre os métodos propostos por Conn, Scheinberg e Vicente dos propostos por Powell, está no número de avaliações da função objetivo

por iteração. Nos algoritmos propostos por Conn, Scheinberg e Vicente, quando o modelo não é plenamente quadrático ou plenamente linear, segundo [7], é executada uma etapa de melhoramento. Esta etapa deixa o conjunto bem posicionado em no máximo $p = (n + 1)(n + 2)/2 - 1$ passos. Deste modo, no pior caso, em toda iteração o algoritmo avalia a função objetivo em p pontos. Por outro lado, nos algoritmos sugeridos por Powell, por exemplo [15], a cada iteração apenas um ponto do conjunto interpolador é trocado e, conseqüentemente, apenas uma avaliação na função objetivo é realizada. Além disso, as iterações denominadas de alternativas também garantem o bom posicionamento dos pontos interpoladores, porém avaliam a função objetivo em apenas um ponto por iteração.

Este trabalho tem âmbito teórico e estuda a prova de convergência proposta por Powell em [17]. Apresenta-se este estudo da seguinte forma. No Capítulo 1 apresentam-se alguns resultados básicos para melhor entendimento do trabalho, assim como o método de região de confiança clássico. No Capítulo 2, discute-se o método simplificado de minimização irrestrita sem derivadas [17]. Além disso, apresenta-se este método por uma sequência de passos bem definidos em forma de algoritmo, juntamente com algumas conseqüências imediatas. Os Capítulos 3 e 4 fornecem resultados preliminares e auxiliares para a prova de convergência global do algoritmo disposto no Capítulo 2. O foco do trabalho, a convergência do método, é apresentado também no Capítulo 4.

Capítulo 1

Revisão de Conceitos

Neste capítulo ressaltam-se alguns resultados fundamentais para o entendimento deste trabalho. As principais referências deste capítulo são [1, 2, 3, 8, 9, 10, 11].

1.1 Conhecimentos básicos

Nesta seção apresenta-se algumas definições e resultados básicos essenciais para o bom entendimento do trabalho. Inicialmente, define-se pontos linearmente independentes e afim-independentes.

Definição 1.1 [9, pág. 99] *Os vetores do conjunto $\{y_0, y_1, \dots, y_n\} \subset \mathbb{R}^n$ são linearmente independentes quando*

$$c_0 y_0 + c_1 y_1 + \dots + c_n y_n = \vec{0}$$

implicar que todos os escalares c_1, c_2, \dots, c_n devem ser nulos.

Desta forma define-se pontos afim-independentes.

Definição 1.2 [1, pág. 36] *Os pontos do conjunto $\{y_0, y_1, \dots, y_n\} \subset \mathbb{R}^n$ são afim-independentes quando os pontos $y_1 - y_0, y_2 - y_0, \dots, y_n - y_0$ são linearmente independentes.*

A seguir é apresentado o Teorema de Weierstrass, cuja demonstração pode ser encontrada em vários livros, por exemplo em [10]. Antes convém definir que um conjunto $C \in \mathbb{R}^n$ é dito compacto quando ele é limitado e fechado.

Teorema 1.3 (Weierstrass) [10, pág. 44] *Toda função real contínua $f : C \rightarrow \mathbb{R}$, definida num compacto $C \subset \mathbb{R}^n$, atinge seu máximo e seu mínimo em C , isto é, existem pontos $x_0, x_1 \in C$ tais que $f(x_0) \leq f(x) \leq f(x_1)$ para qualquer $x \in C$.*

As aproximações de Taylor para funções são muito utilizadas nos métodos de otimização com derivadas [10, pág. 262]. Utiliza-se em algumas demonstrações deste trabalho as aproximações de Taylor de segunda ordem.

Teorema 1.4 (Fórmula de Taylor) *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função duas vezes diferenciável e $a \in \mathbb{R}^n$. Então*

$$f(x) = f(a) + \nabla f(a)^T (x - a) + \frac{1}{2} (x - a)^T \nabla^2 f(a) (x - a) + r(x),$$

$$\text{com } \lim_{x \rightarrow a} \frac{r(x)}{\|x - a\|^2} = 0.$$

Teorema 1.5 (Taylor com resto de Lagrange) *Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^1 e $a, d \in \mathbb{R}^n$. Se f é duas vezes diferenciável no segmento $(a, a + d)$, então existe $t \in (0, 1)$ tal que*

$$f(a + d) = f(a) + \nabla f(a)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(a + td) d.$$

Teorema 1.6 (Desigualdade do Valor Médio) [10, pág. 264] *Dado um conjunto aberto $C \subset \mathbb{R}^n$, seja $f : C \rightarrow \mathbb{R}^n$ diferenciável em cada ponto do segmento de reta aberto $(a, a + d)$ e contínua no segmento fechado $[a, a + d] \subset C$. Se $|f'(x)| \leq M$ para todo $x \in (a, a + d)$, então $|f(a + d) - f(a)| \leq M |d|$.*

Teorema 1.7 [12, pág. 195] *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável e $C \subset \mathbb{R}^n$ convexo. A função f é convexa em C se, e somente se,*

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x)$$

para todos $x, y \in C$.

1.2 Envoltória convexa

Nesta seção estabelece-se conjuntos convexos e define-se o conceito de envoltória convexa, que tem grande importância neste trabalho. Apresentam-se também alguns exemplos para melhor esclarecimento.

Definição 1.8 [10, pág. 12] *Um conjunto $C \subset \mathbb{R}^n$ é dito convexo quando, dados $x, y \in C$ o segmento $[x, y] = \{(1 - t)x + ty \mid t \in [0, 1]\}$ está inteiramente contido em C .*

A Figura 1.1 ilustra dois conjuntos, um convexo e outro não convexo. Note que no segundo conjunto nem todo segmento que liga dois pontos do conjunto está inteiramente contido no conjunto.

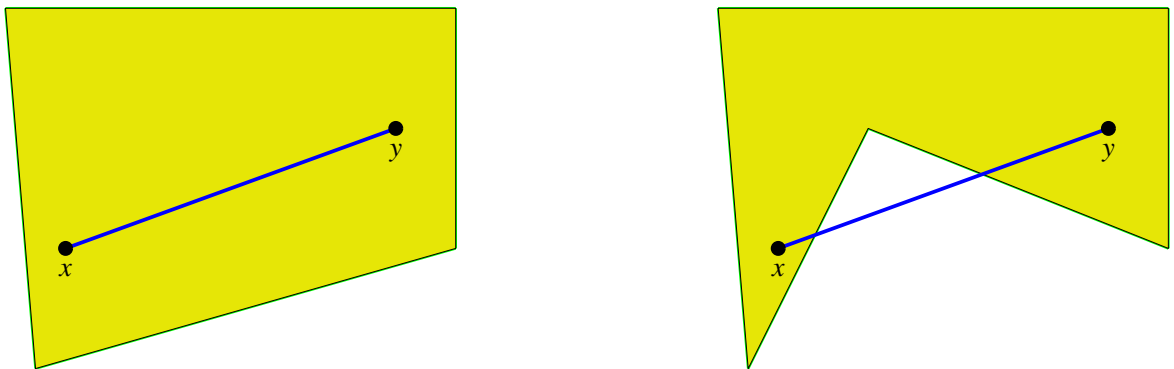


Figura 1.1: Exemplo de conjunto convexo e não convexo.

Definição 1.9 [18, pág. 12] *Dado um conjunto $S \subset \mathbb{R}^n$, a envoltória convexa de S é o menor conjunto convexo que o contém, sendo esta denotada por $\text{conv}(S)$.*

Uma outra interpretação para envoltória convexa é, um ponto $x \in \text{conv}(S)$ se, e somente se,

$$x = \sum_{i=0}^n \lambda_i y_i, \quad \text{com} \quad \sum_{i=0}^n \lambda_i = 1 \quad \text{e} \quad \lambda_i \geq 0,$$

para todo $i \in \{0, 1, \dots, n\}$ e $\{y_0, y_1, \dots, y_n\} \subset S$. A Figura 1.2 ilustra dois conjuntos denotados por S e U e suas respectivas envoltórias convexas, $\text{conv}(S)$ e $\text{conv}(U)$.

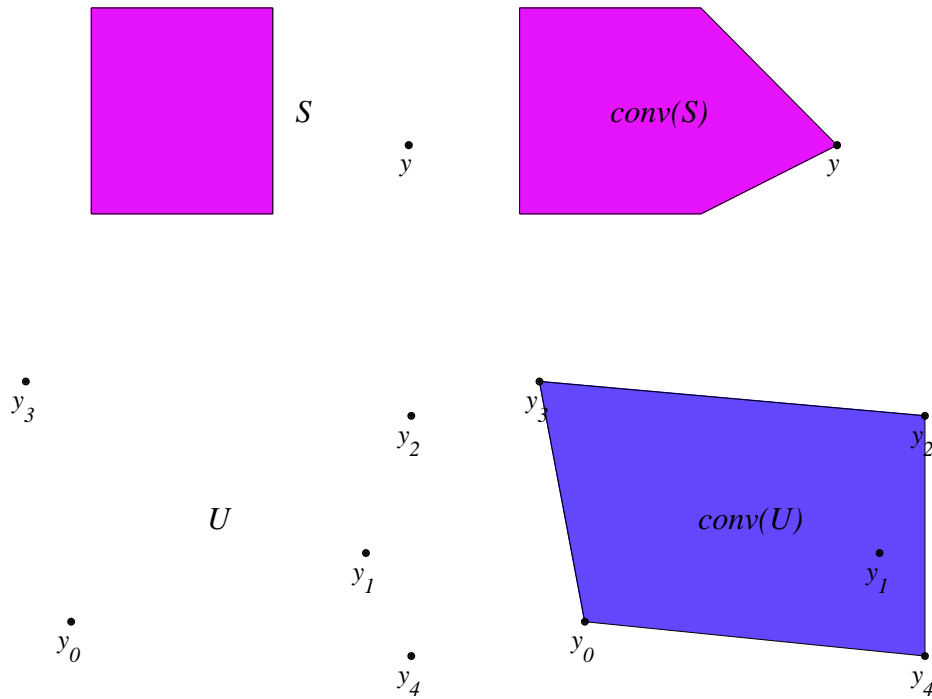


Figura 1.2: Ilustração de dois conjuntos e suas respectivas envoltórias convexas.

A envoltória convexa de um número finito de pontos, $\text{conv}(y_0, y_1, \dots, y_k)$, é denominada polítopo. Porém, se os pontos $y_0, y_1, \dots, y_n \subset \mathbb{R}^n$ do polítopo forem afim-independentes, então o polítopo $\text{conv}(y_0, y_1, \dots, y_n)$ recebe o nome de *simplex* com vértices y_0, y_1, \dots, y_n . Note que não existe um *simplex* em \mathbb{R}^n com mais de $n + 1$ vértices. Deste modo, nem todo polítopo é um *simplex*, mas todo *simplex* é um polítopo. A Figura 1.3 apresenta dois polítopos em \mathbb{R}^2 , sendo o da direita um *simplex*.

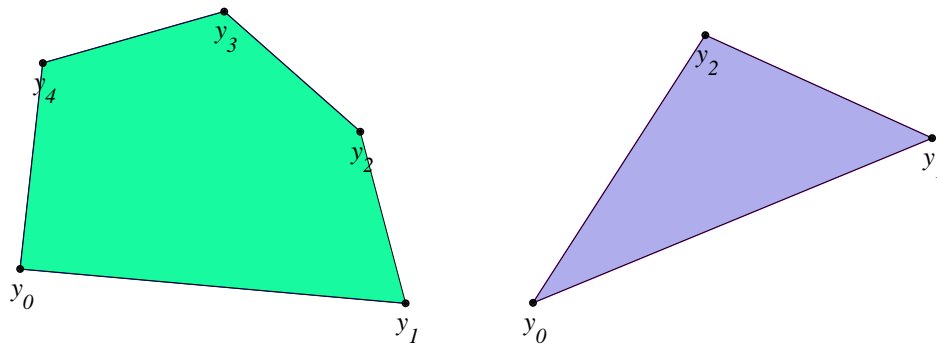


Figura 1.3: Ilustração de envoltórias convexas do tipo polítopo e simplex, respectivamente.

Definição 1.10 [7] Considere a matriz $D = \begin{pmatrix} y_0 & y_1 & \cdots & y_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}$ cujas colunas são os vértices de um simplex acrescidos de 1. Define-se o volume do simplex por

$$\text{vol}(D) = \frac{|\det(D)|}{n!}.$$

Note que esta definição é razoável, uma vez que, em \mathbb{R}^3 o simplex é um tetraedro de vértices y_0, y_1, y_2, y_3 e o volume do tetraedro é

$$\frac{1}{6} |\det(y_1 - y_0, y_2 - y_0, y_3 - y_0)|.$$

Seja $C = \{y_0, y_1, \dots, y_n\} \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto de $(n+1)$ pontos afim-independentes. Considere para o próximo lema o conjunto C^+ constituído dos mesmos vetores do conjunto C com exceção de um ponto y_t , para $t \in \{1, 2, \dots, n\}$, que é substituído por um outro ponto qualquer $y_t^+ \in \mathbb{R}^n$, de modo que os pontos de C^+ são também afim-independentes. Considere as matrizes D e D^+ onde suas colunas são os pontos dos conjuntos C e C^+ , respectivamente, seguidos de 1. Apresenta-se a seguir uma relação entre os volumes dos simplex formados pelos pontos de C e C^+ .

Lema 1.11 [7] Considere duas matrizes D e $D^+ \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}$ como definidas no parágrafo anterior. Então

$$\frac{\text{vol}(D^+)}{\text{vol}(D)} = \frac{h^+}{h}, \quad (1.1)$$

onde h e h^+ são as distâncias do hiperplano formado pelos pontos y_i para $i \in \{0, 1, \dots, n\} \setminus \{t\}$ aos pontos y_t e y_t^+ , respectivamente.

Observe que esse resultado é geométrico para espaços de dimensões 1, 2 e 3. Analisa-se o caso tridimensional, onde são necessários quatro pontos $\{y_0, y_1, y_2, y_3\}$ afim-independentes para gerar um simplex. Para tal, considere sem perda de generalidade dois conjuntos de pontos $C = \{y_0, y_1, y_2, y_3\}$ e $C^+ = \{y_0, y_1, y_2, y_3^+\}$ afim-independentes. Os simplex desses conjuntos são tetraedros representados na Figura 1.4.

Denote por V o volume do primeiro tetraedro e por V^+ o volume do segundo. Note na Figura 1.4 que ao trocar apenas um ponto do conjunto, a base permanece a mesma e apenas a altura muda. Deste modo, considerando o cálculo dos volumes de uma forma geométrica, sabe-se que os volumes dos tetraedros são

$$V = \frac{\text{base} \cdot h}{3} \quad \text{e} \quad V^+ = \frac{\text{base} \cdot h^+}{3}.$$

Desta forma, obtém-se a razão (1.1).

1.3 Funções quadráticas

Considere a seguinte função quadrática

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + c,$$

com $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica, $b \in \mathbb{R}^n$ e $c \in \mathbb{R}$. Apresenta-se no decorrer desta seção algumas propriedades desta função.

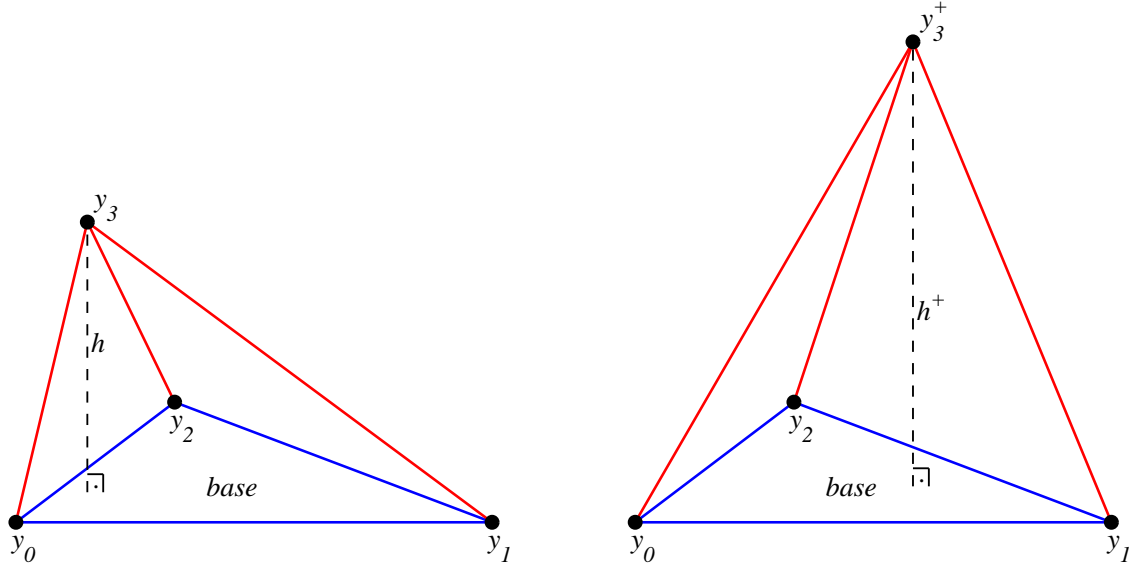


Figura 1.4: Simplex formados por dois conjuntos de pontos em \mathbb{R}^3 que diferem em apenas um ponto.

Lema 1.12 *Sejam λ o menor autovalor de A e $\rho > 0$. O problema*

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s. a} \quad & x^T x \leq \rho^2 \end{aligned}$$

possui pelo menos um minimizador global x^ e*

$$f(0) - f(x^*) \geq -\frac{1}{2}\lambda\rho^2.$$

Demonstração.

Como o conjunto viável é compacto e f é contínua, pelo Teorema 1.3 existe um minimizador global x^* . Para provar a desigualdade, considere v um autovetor associado a λ tal que $\|v\| = \rho$ e $b^T v \leq 0$. Assim,

$$f(0) - f(x^*) \geq f(0) - f(v) = -\frac{1}{2}\lambda v^T v - b^T v \geq -\frac{1}{2}\lambda\rho^2.$$

□

Lema 1.13 *Se A é semidefinida positiva e f é ilimitada inferiormente, então b não pertence ao subespaço gerado pelos autovetores associados aos autovalores positivos de A . Equivalentemente, existe um vetor $w \in \mathcal{N}(A)$ tal que $\|w\| = 1$ e $b^T w > 0$.*

Demonstração.

Seja $\{v_1, \dots, v_n\}$ uma base ortonormal de autovetores tal que $v_1, \dots, v_{\ell-1}$ são os autovetores associados ao autovalor nulo e v_ℓ, \dots, v_n os autovetores associados aos autovalores positivos. Então, para $i = 1, \dots, \ell - 1$ e $j = \ell, \dots, n$, tem-se

$$Av_i = 0 \quad \text{e} \quad v_j = A \left(\frac{1}{\lambda_j} v_j \right).$$

Assim, os vetores $[v_1, \dots, v_{\ell-1}]$ estão contidos no núcleo da matriz A e os vetores $[v_\ell, \dots, v_n]$ estão contidos na imagem da matriz A . Como $\dim(\mathcal{N}(A)) + \dim(\text{Im}(A)) = n$, segue que

$$[v_1, \dots, v_{\ell-1}] = \mathcal{N}(A) \quad \text{e} \quad [v_\ell, \dots, v_n] = \text{Im}(A).$$

Mas $Ax + b = \nabla f(x) \neq 0$, para todo $x \in \mathbb{R}^n$, pois do contrário a função convexa f teria um minimizador global. Isto prova que $b \notin \text{Im}(A) = [v_\ell, \dots, v_n]$. Para verificar a equivalência afirmada no lema, note que

$$\mathcal{N}(A)^\perp = [v_\ell, \dots, v_n].$$

Assim, $b \notin [v_\ell, \dots, v_n]$ equivale a $b \notin \mathcal{N}(A)^\perp$, isto é, existe um vetor $w \in \mathcal{N}(A)$ tal que $b^T w \neq 0$. Normalizando e tomando o oposto, se necessário, tem-se $\|w\| = 1$ e $b^T w > 0$. □

Lema 1.14 *Se f é limitada inferiormente, então A é semidefinida positiva e f possui minimizador global.*

Demonstração.

Note primeiro que se λ é um autovalor de A , com autovetor v , então

$$f(tv) = \frac{1}{2}t^2\lambda v^T v + tb^T v + c.$$

Como f é limitada inferiormente, tem-se $\lambda \geq 0$. Para provar a outra afirmação, considere $w \in \mathcal{N}(A)$. Assim, $f(tw) = tb^T w + c$ e portanto, usando novamente a limitação de f , conclui-se que $b^T w = 0$. Isto significa que $b \in \mathcal{N}(A)^\perp = \text{Im}(A^T) = \text{Im}(A)$, ou seja, existe $y^* \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ay^* = b$. Definindo $x^* = -y^*$, tem-se $\nabla f(x^*) = Ax^* + b = 0$. Portanto, usando o Teorema 1.7, segue que x^* é um minimizador global de f . □

Lema 1.15 *Se f é limitada inferiormente, então existe um único $x^* \in \text{Im}(A)$ satisfazendo $Ax^* + b = 0$. Além disso, se λ_ℓ é o menor autovalor positivo de A , então $\|Ax^*\| \geq \lambda_\ell \|x^*\|$.*

Demonstração.

Como $\text{Im}(A^2) \subset \text{Im}(A)$ e $\dim(\text{Im}(A^2)) = \dim(\text{Im}(A^T A)) = \dim(\text{Im}(A))$, tem-se que $\text{Im}(A^2) = \text{Im}(A)$. Pelo Lema 1.14, $b \in \text{Im}(A) = \text{Im}(A^2)$. Assim, existe $u \in \mathbb{R}^n$ tal que $A^2 u = b$. Isto significa que $A(-Au) + b = 0$, ou seja, $x^* = -Au \in \text{Im}(A)$ e $Ax^* + b = 0$. Para provar a unicidade, note que se $x^*, \bar{x} \in \text{Im}(A)$ são tais que $Ax^* + b = 0$ e $A\bar{x} + b = 0$, então $x^* - \bar{x} \in \text{Im}(A) = \text{Im}(A^T)$ e $A(x^* - \bar{x}) = 0$. Mas isto significa que $x^* - \bar{x} = 0$.

Para estabelecer a desigualdade, considere primeiro o caso em que A é definida positiva. Assim,

$$\|Ax^*\|^2 = (x^*)^T A^2 x^* \geq \lambda_\ell^2 \|x^*\|^2.$$

Para o caso em que A possui autovalor nulo, considere $\{v_1, \dots, v_n\}$ uma base ortonormal de autovetores tal que $v_1, \dots, v_{\ell-1}$ são os autovetores associados ao autovalor nulo e v_ℓ, \dots, v_n os autovetores associados aos autovalores positivos. Definindo $P = (v_1 \dots v_n)$, $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ e $\hat{c} = P^T b$, tem-se que se

$$z^* \in \text{Im}(D) \quad \text{e} \quad Dz^* + \hat{c} = 0, \tag{1.2}$$

então $x^* = Pz^* \in \text{Im}(A)$ e $Ax^* + b = 0$. De fato,

$$x^* = Pz^* = PDw^* = APw^* \in \text{Im}(A)$$

e

$$Ax^* + b = P(Dz^* + \widehat{c}) = 0.$$

Agora encontra-se z^* satisfazendo (1.2). Defina $w^* \in \mathbb{R}^n$ por

$$w_i^* = \begin{cases} 0, & \text{se } i = 1, \dots, \ell - 1 \\ \frac{-\widehat{c}_i}{\lambda_i^2}, & \text{se } i = \ell, \dots, n \end{cases}$$

e $z^* = Dw^*$. Pelos argumentos vistos nos lemas anteriores, $b \in \mathcal{N}(A)^\perp = [v_1, \dots, v_{\ell-1}]^\perp$. Assim, $\widehat{c}_i = v_i^T b = 0$, para $i = 1, \dots, \ell - 1$ e, consequentemente, $Dz^* + \widehat{c} = 0$. Para concluir a demonstração, note que

$$\|z^*\|^2 = \sum_{i=\ell}^n \left(\frac{\widehat{c}_i}{\lambda_i} \right)^2 \leq \frac{1}{\lambda_\ell^2} \sum_{i=\ell}^n \widehat{c}_i^2 = \frac{1}{\lambda_\ell^2} \|\widehat{c}\|^2.$$

Além disso, como $x^* = Pz^*$, $Ax^* + b = 0$ e $\widehat{c} = P^T b$, obtém-se $\|x^*\| = \|z^*\|$ e $\|Ax^*\| = \|b\| = \|\widehat{c}\|$. Portanto,

$$\|x^*\|^2 \leq \frac{1}{\lambda_\ell^2} \|b\|^2 = \frac{1}{\lambda_\ell^2} \|Ax^*\|^2.$$

□

1.4 Método de região de confiança

Considere o seguinte problema de minimização

$$\begin{aligned} \min \quad & F(x) \\ \text{s.a.} \quad & x \in \Omega \end{aligned} \tag{1.3}$$

onde $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função duas vezes diferenciável e $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto qualquer. O método de região de confiança é um dos métodos que visa resolver o problema (1.3). A ideia do método é definir um modelo da função objetivo e uma região em torno do ponto corrente na qual confia-se no modelo. A partir daí, encontra-se o minimizador aproximado do modelo e caso este forneça uma redução razoável em F , aceita-se o ponto e repete-se esse processo. Caso contrário, pode ser que o modelo não esteja representando adequadamente a função, neste caso, o ponto é recusado e o tamanho da região é reduzido para encontrar um novo minimizador [3, 8].

Considere $k \in \mathbb{N}$, $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C^2 e um ponto $x^k \in \mathbb{R}^n$. O modelo quadrático de F em torno de x^k é definido por

$$Q^k(x) = F(x^k) + \nabla F(x^k)^T (x - x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^T G^k (x - x^k), \tag{1.4}$$

onde $G^k \subset \mathbb{R}^{n \times n}$ pode ser a hessiana $\nabla^2 F(x^k)$ ou qualquer outra matriz simétrica uniformemente limitada. O modelo definido acima aproxima bem a função F numa vizinhança de x^k . Portanto considera-se uma região em torno de x^k em que o modelo fornece uma

boa aproximação para F . Deste modo, considera-se $\rho > 0$ o raio da região de confiança e a seguinte região

$$\{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^k\| \leq \rho^k\}.$$

Para simplificar a notação, considere

$$d = x - x^k \quad \text{e} \quad m^k(d) = Q^k(x^k + d)$$

Na primeira etapa do método, resolve-se (possivelmente de forma aproximada) o subproblema

$$\begin{aligned} \min \quad & m^k(d) := F(x^k) + \nabla F(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T G^k d \\ \text{s.a.} \quad & \|d\| \leq \rho. \end{aligned} \tag{1.5}$$

Denomina-se por d^k o resultado aproximado obtido para o problema (1.5). A outra etapa consiste em avaliar o passo. Espera-se que o ponto $x^k + d^k$ proporcione uma redução na função objetivo que seja no mínimo uma fração da redução obtida no modelo. Para tal, define-se $ared$ como sendo a redução real na função objetivo e $pred$ a redução predita pelo modelo, das seguintes formas

$$\begin{aligned} ared &= F(x^k) - F(x^k + d^k) \\ pred &= m^k(0) - m^k(d^k) = Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k). \end{aligned} \tag{1.6}$$

Assim, o passo d^k será aceito se, e somente se,

$$ared > \chi \, pred, \tag{1.7}$$

onde $\chi > 0$ é uma constante dada. Neste caso, define-se $x^{k+1} = x^k + d^k$ e repete-se o processo. Caso contrário, recusa-se o passo d^k , reduz-se o raio ρ^k e resolve-se o subproblema (1.5) com o novo raio.

Resolver o problema (1.5) de forma aproximada significa obter uma solução que forneça uma redução suficiente no valor do modelo. Neste caso, baseia-se no passo de Cauchy e exige-se que o ponto obtido forneça pelo menos uma porcentagem da redução do passo de Cauchy que define-se a seguir.

Definição 1.16 *Dado um ponto x^k e o raio ρ^k da região de confiança, define-se por d_c^k o passo de Cauchy do modelo (1.4), como sendo um múltiplo de $\nabla F(x^k)$, ou seja, $d_c^k = -u \nabla F(x^k)$, onde $u \in \mathbb{R}$ é uma solução global do problema abaixo*

$$\begin{aligned} \min \quad & Q^k(x^k + u \nabla F(x^k)) \\ \text{s.a.} \quad & \|u \nabla F(x^k)\| \leq \rho^k. \end{aligned} \tag{1.8}$$

Note que $d_c^k = 0$, somente se $\nabla F(x^k) = 0$, uma vez que o conjunto viável do problema acima é compacto e fechado.

Outra alteração que pode ocorrer no raio da região de confiança é quando o algoritmo conseguiu uma redução grande na função objetivo e o passo d^k está na fronteira da região de confiança. Neste caso, o tamanho do raio ρ^k pode ser pequeno e consequentemente interferir na determinação de d^k , caso isso ocorra aumenta-se o raio. Este fato pode ser esclarecido pelo primeiro gráfico da Figura 1.5. Por outro lado, se o passo está estritamente dentro da região, infere-se que o raio atual ρ^k não interfere no progresso do algoritmo e deixa-se inalterado o seu valor para a próxima iteração, conforme apresentado no segundo gráfico da Figura 1.5.

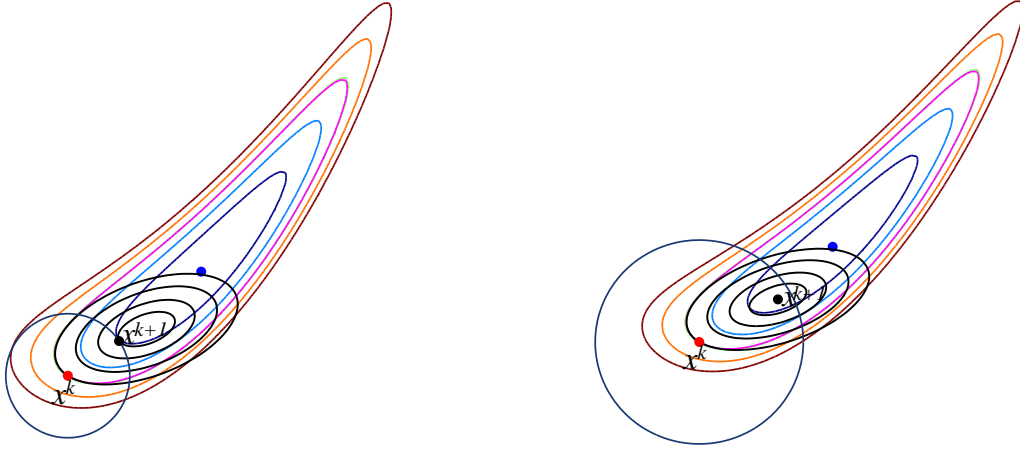


Figura 1.5: Ilustração de duas possibilidades de passos do método de região de confiança, em que os raios são diferentes [8].

1.4.1 Algoritmo

Agora formaliza-se a discussão anterior no seguinte algoritmo que se baseia no proposto em [13]. Também considera-se importante citar [3], uma referência moderna sobre métodos de região de confiança.

Algoritmo 1.1 *Algoritmo para o método de região de confiança*

Dado: $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $\bar{\rho} > 0$, $\rho^1 \in (0, \bar{\rho})$ e $\chi \in \left[0, \frac{1}{4}\right)$

$k = 1$

REPITA enquanto $\nabla F(x^k) \neq 0$

 Calcule d^k , solução aproximada de (1.5)

 Calcule $ared$ e $pred$, conforme definido em (1.6)

 Se $ared > \chi pred$

$$x^{k+1} = x^k + d^k$$

 Senão

$$x^{k+1} = x^k$$

 Se $\frac{ared}{pred} < \frac{1}{4}$

$$\rho^{k+1} = \frac{\rho^k}{2}$$

 Senão

$$\text{Se } \frac{ared}{pred} > \frac{3}{4} \text{ e } \|d^k\| = \rho^k$$

$$\rho^{k+1} = \min \{2\rho^k, \bar{\rho}\}$$

 Senão

$$\rho^{k+1} = \rho^k$$

$k = k + 1$

Note que $m^k(0) = \nabla F(x^k)$. Assim, se $\nabla F(x^k) \neq 0$, então $m^k(0) \neq 0$ e portanto a redução no modelo obtida no Algoritmo 1.1 será positiva.

Capítulo 2

Descrição do Algoritmo

Neste capítulo apresenta-se o método proposto por Powell em [17], que tem como objetivo resolver o problema irrestrito

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} F(x) \quad (2.1)$$

sem utilizar as derivadas da função objetivo $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, onde F é duas vezes diferenciável e limitada inferiormente. Além de não utilizar as derivadas da função F , no método tenta-se evitar avaliações desnecessárias na função objetivo.

Embora F seja diferenciável, supõe-se que suas derivadas não estejam disponíveis e que as avaliações da função sejam caras computacionalmente. Este é o caso em diversas aplicações quando se deseja minimizar uma função medida por algum experimento ou dada por alguma simulação.

Durante as iterações, a função objetivo é aproximada por interpolação polinomial e esta aproximação é denominada de modelo. Os modelos são minimizados por uma variante do método de região de confiança como apresentado na Seção 1.4, na esperança de que ocorra uma redução significativa do valor da função objetivo. Existem também dois outros tipos de minimizações que têm a finalidade de melhor distribuir os pontos interpoladores, as quais são denominadas por *alternativas alpha* e *alternativas beta*.

2.1 Descrição geral

Nesta seção são descritas as condições gerais para a obtenção do método proposto por Powell em [17], o qual minimiza localmente um problema irrestrito.

A cada iteração realizam-se tentativas de região de confiança, alternativas *alpha* e alternativas *beta*. Se uma destas tentativas satisfaz certas condições convenientes, que serão apresentadas adiante, e, além disso, a função F é avaliada no ponto obtido, então a sequência gerada pelo algoritmo é atualizada e é incrementado o contador da iteração, a qual é caracterizada com o nome do tipo desta tentativa. Assim, uma tentativa de região de confiança, alternativa *alpha* ou alternativa *beta* pode ser executada e, caso não avalie a função em nenhum ponto, o contador da iteração não é incrementado e tenta-se um outro tipo de tentativa ainda na mesma iteração. Deste modo, o contador de avaliações da função objetivo coincide com o contador de iterações.

2.1.1 Pontos interpoladores

Neste trabalho, o modelo que aproxima F é determinado por uma interpolação polinomial de ordem 2 com $n + 1$ pontos, onde a Hessiana do modelo é pré determinada

sem o uso da interpolação. A única exigência para esta matriz é que esta seja simétrica e limitada inferiormente.

O trabalho proposto em [17] tem objetivo teórico sendo superado na prática por muitos outros métodos que foram desenvolvido com intuito prático. Por exemplo o *software* NEWUOA proposto também por Powell em [15]. Neste foram desenvolvidas técnicas para uma boa precisão e robustez na obtenção do minimizador da função. Além disso, é exigido pelo menos $n + 2$ pontos interpoladores por iteração, sendo sugerido $2n + 1$, fornecendo assim informações da Hessiana da função objetivo, ao contrário no método descrito em [17] que não se tem nenhuma informação da Hessiana da função objetivo.

Em cada iteração tem-se um conjunto de $n + 1$ pontos afim-independentes, conforme a Definição 1.2, os quais podem ser os mesmos da iteração anterior ou não. Representa-se o conjunto interpolador e os pontos interpoladores no início de uma iteração qualquer de índice $k \in \{1, 2, 3, \dots\}$ por

$$P^k = \{y_0, y_1, \dots, y_n\} \quad (2.2)$$

e no final desta, por

$$P^{k+1} = \{y_0^+, y_1^+, \dots, y_n^+\}. \quad (2.3)$$

Para facilitar a notação os índices de iteração são omitidos nos pontos interpoladores. Porém, em algumas demonstrações é conveniente utilizar esses índices para melhor esclarecimento.

A obtenção dos pontos é feita da seguinte forma. Antes da primeira iteração é gerado um conjunto interpolador com $n + 1$ pontos afim-independentes. Nas demais iterações, o conjunto interpolador de uma iteração para outra difere em no máximo um elemento, que é determinado pelas iterações de região de confiança ou alternativas. Além disso, na k -ésima iteração indexa-se os pontos do conjunto P^k de modo que o ponto y_0 seja o ponto que forneça o menor valor de F entre todos os pontos interpoladores, ou seja, para cada iteração os pontos y_i satisfazem,

$$F(y_0) \leq F(y_i) \quad (2.4)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$.

2.1.2 Sequência gerada

Inicializa-se a sequência fazendo $x^1 = y_0$, onde $y_0 \in P^1$ e satisfaz (2.4). No decorrer da k -ésima iteração, determina-se o passo d^k a partir do ponto x^k através de um dos três tipos de tentativas já mencionadas. Destas, a tentativa de região de confiança tem a finalidade de encontrar um passo d^k de modo que o modelo em $x^k + d^k$ seja substancialmente menor que em x^k . As tentativas alternativas visam melhorar o conjunto interpolador.

Sendo obtido o ponto $x^k + d^k$, se este satisfizer as exigências que serão discutidas adiante, é atualizada a sequência de modo que,

$$x^{k+1} = \begin{cases} x^k + d^k, & \text{se } F(x^k + d^k) < F(x^k) \\ x^k, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.5)$$

O novo ponto $x^k + d^k$ substitui um dos pontos interpoladores do conjunto P^k com exceção do ponto y_0 , obtendo assim o novo conjunto P^{k+1} . Além disso, são reordenados os pontos

de P^{k+1} segundo (2.4). Note que, como y_0 é o ponto interpolador que fornece o menor valor da função objetivo, é razoável que este permaneça no conjunto e não seja substituído por $x^k + d^k$. Desta maneira, por (2.4) e (2.5) conclui-se que cada elemento da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ representa o elemento do conjunto interpolador P^k que fornece o menor valor para F , ou seja,

$$x^k = y_0, \quad (2.6)$$

onde $y_0 \in P^k$, para todo $k \in \{1, 2, 3, \dots\}$.

Decorre imediatamente de (2.5) que a sequência $(F(x^k))_{\mathbb{R}^n}$ gerada pelo algoritmo é monótona não crescente.

2.1.3 Modelo interpolador

Dado $x^k \in \mathbb{R}^n$, considere o modelo interpolador quadrático da k -ésima iteração $Q^k : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ da seguinte forma

$$Q^k(x) = F(x^k) + (x - x^k)^T g^k + \frac{1}{2}(x - x^k)^T G^k (x - x^k), \quad (2.7)$$

onde $g^k \in \mathbb{R}^n$ e $G^k \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Ressalta-se que o objetivo geral ao longo do algoritmo é encontrar o minimizador de cada modelo em uma determinada região, na esperança de que pelo menos uma parte desta redução seja herdada pela função objetivo. Note que para determinar o modelo basta encontrar g^k e G^k .

Os modelos são determinados da seguinte forma, inicialmente, escolhe-se uma matriz simétrica qualquer para representar G^k de dimensão $n \times n$. Depois que G^k é determinada, o método utiliza o conjunto P^k e encontra de forma única o vetor g^k . Este vetor é obtido através das condições de interpolação que garantem a mesma imagem para o modelo e a função em cada um dos pontos interpoladores, ou seja, para $y_i \in P^k$ e $i = 0, 1, \dots, n$, tem-se

$$Q^k(y_i) = F(y_i). \quad (2.8)$$

Para o primeiro modelo Q^1 a matriz $G^1 = \nabla^2 Q^1$ é um dado de entrada e o vetor g^1 é determinado utilizando as condições (2.8). Em alguns casos a Hessiana do modelo não é obtida de forma arbitrária e sim como sendo a Hessiana do modelo anterior.

Para a teoria é necessário que todas as matrizes $G^k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ além de simétricas sejam uniformemente limitadas. Em particular, pode-se considerar as matrizes $G^k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ como sendo todas nulas e neste caso a aproximação seria de ordem 1, mesmo que uma aproximação linear não seja tão precisa quanto uma aproximação quadrática.

2.1.4 Parâmetros

No decorrer do algoritmo são utilizados três parâmetros reais e dois naturais: α , β , γ , τ_α e τ_β . O parâmetro α é qualquer constante no intervalo $(0, 1)$ e τ_α qualquer número natural e ambos são utilizados durante uma tentativa alternativa com escolha *alpha*. Analogamente, $\beta > 1$ e $\tau_\beta \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ são necessários para tomar decisões nas alternativas com escolhas *beta*. E finalmente $\gamma > 0$ é empregado durante uma tentativa do tipo região de confiança. Os parâmetros sugeridos em [17, pág. 6] são $\alpha = 0.1$, $\tau_\alpha = 1$, $\beta = 5$, $\tau_\beta = 5$ e $\gamma = 0.01$.

2.2 Tentativa de região de confiança

As tentativas de região de confiança têm como objetivo minimizar o modelo Q^k dentro de uma determinada região em que se confia no modelo. Embora o raio da região de confiança não seja constante ao longo das iterações, o índice é omitido para não sobrecarregar a notação. Desta forma, dada uma iteração, representa-se por ρ o raio considerado no decorrer desta. Assim, ao longo das tentativas de região de confiança resolve-se o problema

$$\begin{aligned} \min \quad & Q^k(x^k + d) \\ \text{s.a.} \quad & \|d\| \leq \rho \end{aligned} \quad (2.9)$$

de forma exata ou aproximada, onde Q^k é o modelo descrito em (2.7).

No método de região de confiança apresentado na Seção 1.4, o raio da região pode aumentar ou diminuir com a finalidade de melhorar o desempenho do método, porém neste algoritmo o raio não aumenta. O primeiro raio deve ser qualquer número positivo, mas é razoável que esse não seja muito pequeno, uma vez que no decorrer do algoritmo não aumenta-se o raio. A redução no raio é feita por um fator de 10 e ocorre apenas em uma determinada ocasião a ser apresentada.

Dado um raio da região de confiança ρ , representa-se por ν o número da primeira iteração que considerou o raio ρ . Será visto mais adiante que ν não é apenas a primeira iteração que considera o raio ρ , como também a iteração em que o raio foi alterado para ρ .

Exigir que d^k seja uma solução exata do problema (2.9) não é computacionalmente viável. Deste modo o método aceita passos que forneçam um decréscimo tão bom quanto o do passo de Cauchy conforme Definição 1.16, mas não necessariamente a solução exata.

Condição 2.1 *Condição sobre o passo de região de confiança*

Suponha que na k -ésima iteração uma tentativa de região de confiança esteja em consideração e que ν seja o índice da primeira iteração que utilizou o raio ρ , onde ρ é o raio considerado nesta tentativa. Seja d_c^k o passo de Cauchy conforme Definição 1.16. O passo de região de confiança do algoritmo é qualquer vetor d^k que satisfaz

$$Q^k(x^k + d^k) \leq Q^k(x^k + d_c^k) \quad e \quad \|d^k\| \leq \rho, \quad (2.10)$$

exceto no caso em que $k \geq \nu + 5$ e

$$\eta^k = \max \{ |Q^j(x^j + d^j) - F(x^j + d^j)| : j = \nu, \nu + 1, \dots, k - 1 \} \quad (2.11)$$

seja nulo. Nesse caso d^k deve ser uma solução exata do problema (2.9).

Observe que, dada uma iteração k , η^k representa o maior erro na aproximação $Q^j(x^j + d^j) \approx F(x^j + d^j)$, onde j representa o índice de todas as iterações de índices antes da k -ésima que utilizam o mesmo raio. Note também que mesmo que d^k seja obtido de forma exata, este satisfaz (2.10). Salienta-se que os resultados obtidos permanecem válidos se, na Condição 2.1 a exigência $k \geq \nu + 5$ seja substituída por $k \geq \nu + M$, com $M \in \mathbb{N}^*$.

Nas iterações em que o raio é alterado é definido η^ν como sendo nulo. Esta atualização ($\eta^\nu = 0$) é uma desvantagem, pois neste caso o passo é encontrado de forma exata. Além disso, a teoria empregada se tornaria mais difícil se na definição (2.11) fossem considerados os erros $|Q^j(x^j + d^j) - F(x^j + d^j)|$ com j menor que ν .

Para evitar excesso na quantidade de avaliações na função objetivo, o novo valor da função objetivo $F(x^k + d^k)$ só é calculado quando as condições

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) > \gamma\eta^k \quad \text{e} \quad \|d^k\| \geq \frac{1}{2}\rho, \quad (2.12)$$

são satisfeitas, onde η^k é definido em (2.11).

A primeira das condições presentes em (2.12) mostra o propósito para γ ser um número real positivo. A segunda condição de (2.12) garante que se o tamanho do passo obtido é pequeno, então o valor de $F(x^k + d^k)$ não é calculado, afinal isso é um indício para que haja um decréscimo no raio da região de confiança. Caso d^k não satisfaça (2.12), a tentativa é definida como *insucesso* e é executado outro tipo de tentativa sem incrementar k .

Condição 2.2 *Passo bem sucedido*

Um passo d^k de região de confiança é dito **bem sucedido** quando as desigualdades (2.12) e

$$F(x^k) - F(x^k + d^k) \geq 0.1 \{Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k)\} \quad (2.13)$$

são satisfeitas.

Note que na comparação acima tem-se exatamente a condição (1.7) com $\chi = 0.1$ e as expressões *ared* e *pred* definidas em (1.6). É fixado um valor para χ por simplicidade, mas a teoria continua válida para qualquer valor de $\chi \in (0, 1)$. No decorrer do trabalho menciona-se tanto que o passo é bem sucedido, como que a tentativa de região de confiança é bem sucedida, ou ainda de sucesso, mas todas representam a condição acima.

Uma interpretação para a condição anterior é que um passo d^k de região de confiança é bem sucedido se o novo ponto $x^k + d^k$ fornece, com relação ao ponto anterior x^k , uma redução na função objetivo com pelo menos uma porcentagem do que foi reduzido através do modelo Q^k . Observe na expressão (2.13) que essa porcentagem é de pelo menos 10%. Além disso, ela também indica que um passo d^k pode ser calculado através de uma tentativa de região de confiança e não ser aceito. Caso d^k não satisfaça (2.13), esta tentativa também é definida como *insucesso*, porém como $F(x^k + d^k)$ foi calculado, incrementa-se o valor de k . Por outro lado, se (2.13) for satisfeita, o passo é aceito, a tentativa é computada como iteração de região de confiança e algum ponto y_t do conjunto interpolador P^k não estará no conjunto P^{k+1} para que o novo ponto aceito $x^k + d^k$ entre em seu lugar. Discute-se essa escolha adiante, lembrando que y_0 é o ponto que fornece o menor valor na função objetivo e consequentemente não é um candidato a sair do conjunto.

Condição 2.3 *Passo mal sucedido*

Um passo de região de confiança é dito **mal sucedido** quando pelo menos uma das condições presentes em (2.12) e (2.13) não é verificada.

No decorrer do algoritmo utiliza-se um conjunto $\mathcal{B} \subset \{1, 2, \dots, n\}$ que sofre algumas alterações ao longo das iterações de acordo com certas condições. Uma delas é, o conjunto \mathcal{B} recebe todos os inteiros de 1 a n no início de cada tentativa com um novo raio da região de confiança, o qual discute-se no decorrer deste capítulo, e sempre que um passo do tipo região de confiança é bem sucedido. Para as demais iterações, \mathcal{B} perde um elemento t sempre que houver uma troca de y_t por $x^k + d^k$, desde que $t \in \mathcal{B}$, ou seja, não tenha sido removido anteriormente. Isto faz com que a quantidade de elementos de \mathcal{B} decresça monotonicamente até que seja preenchido novamente.

Depois que d^k é obtido conforme a Condição 2.1 e o passo de região de confiança é considerado bem sucedido, é necessário determinar o ponto $y_t \in P^k$ que será substituído pelo novo ponto $x^k + d^k$. Para tal, são encontrados os valores θ_i , para $i \in \{0, 1, \dots, n\}$, que satisfazem as seguintes igualdades:

$$x^k + d^k = \sum_{i=0}^n \theta_i y_i, \quad (2.14)$$

$$\sum_{i=0}^n \theta_i = 1. \quad (2.15)$$

Note que os valores de θ_i são unicamente determinados. De fato, por (2.15) tem-se $\theta_0 = 1 - \sum_{i=1}^n \theta_i$. Substituindo em (2.14) e agrupando os termos obtém-se

$$x^k + d^k - y_0 = \sum_{i=1}^n \theta_i (y_i - y_0). \quad (2.16)$$

Assim, como $y_0 = x^k$ tem-se $d^k = \sum_{i=1}^n \theta_i (y_i - y_0)$. Como o conjunto $\{y_1 - y_0, \dots, y_n - y_0\}$ forma uma base para o \mathbb{R}^n a combinação linear é unicamente determinada, pois é um sistema possível determinado.

Condição 2.4 *Ponto a deixar o conjunto interpolador*

Dada uma iteração k de região de confiança, ou seja uma tentativa de região de confiança de sucesso, considere os valores θ_i satisfazendo (2.14) e (2.15), para $i \in \{0, 1, \dots, n\}$. O índice $t \in \{1, 2, \dots, n\}$ que indica o ponto y_t que não entrará no conjunto interpolador P^{k+1} nessa iteração é determinado de modo a tornar verdadeira a desigualdade

$$|\theta_t| \geq |\theta_i|, \quad (2.17)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$.

Observe que os valores de θ_i não são todos nulos, para $i = 1, 2, \dots, n$. De fato, se todos fossem nulos, pela relação (2.16) tem-se $x^k + d^k = y_0$. Como $x^k = y_0$ obtém-se $d^k = 0$, mas isso não pode ocorrer já que um passo de região de confiança foi assumido e consequentemente d^k satisfaz (2.12). Portanto, por (2.17) tem-se $|\theta_t| > 0$. Será visto no próximo capítulo que o volume da nova envoltória convexa, formada pelos pontos P^{k+1} obtidos numa iteração de região de confiança, é o volume da envoltória convexa antiga, formada pelos pontos P^k , multiplicada por $|\theta_t|$.

Para ilustrar a Condição 2.4, suponha que deseja-se minimizar uma função $F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ e que na k -ésima iteração os pontos interpoladores y_0, y_1, y_2 estejam dispostos conforme Figura 2.1 lado esquerdo, onde ρ é o raio da região considerado nesta tentativa. De acordo com a discussão desta seção, suponha que o passo d^k que satisfaz a Condição 2.1 seja bem sucedido e que o ponto $x^k + d^k$ esteja como disposto no lado direito da Figura 2.1. Desta forma, a k -ésima iteração é de região de confiança. Além disso, o conjunto interpolador é atualizado de modo que a Condição 2.4 seja satisfeita, é fácil ver pela Figura 2.1 que $t = 2$ é o índice que satisfaz (2.17), uma vez que $\theta_1 = 0$ e $\theta_2 > 0$.

Em seguida obtém-se o novo conjunto interpolador P^{k+1} com $y_0^+ = x^k + d^k$, pois a desigualdade (2.13) foi satisfeita, $y_1^+ = y_1$ e $y_2^+ = y_0$. Atualiza-se o ponto x^{k+1} ,

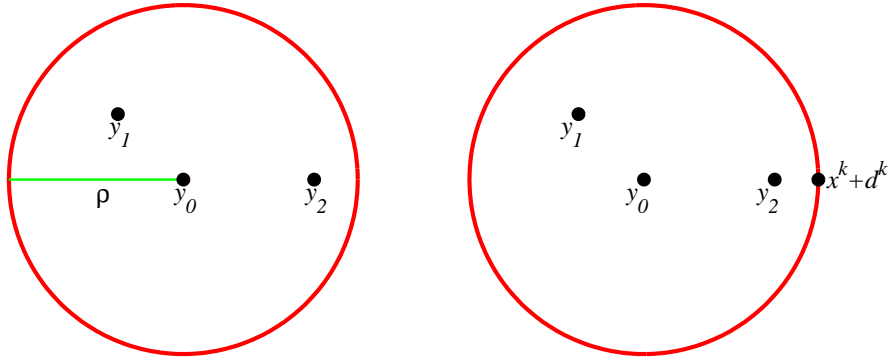


Figura 2.1: Passos realizados por uma tentativa de região de confiança bem sucedida.

conforme (2.5). Escolhe-se G^{k+1} e encontra-se o modelo Q^{k+1} segundo as condições de interpolação. Finalmente incrementa-se k .

Suponha como um segundo exemplo que no decorrer das iterações ocorra outra tentativa de região de confiança com uma configuração conforme Figura 2.2. Neste caso

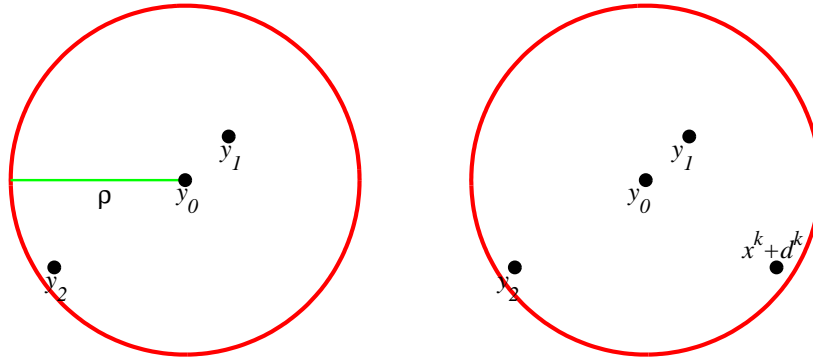


Figura 2.2: Passos realizados por uma segunda tentativa de região de confiança bem sucedida

não é tão fácil identificar o ponto que não irá pertencer ao novo conjunto interpolador, porém como veremos a seguir a Condição 2.4 garante que esta escolha de t é a que maximiza o volume da envoltória convexa dos pontos envolvidos. Deste modo, conclui-se que o ponto que não vai pertencer ao novo conjunto é o ponto y_1 .

2.3 Tentativa alternativa

Esta etapa se preocupa com a geometria dos pontos interpoladores trocando $y_t \in \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ por $x^k + d^k$ de modo a melhorar o posicionamento dos pontos. Salienta-se que os conjuntos interpoladores P^k e P^{k+1} diferem no máximo em um ponto, se a ordem disposta for desconsiderada.

As tentativas alternativas seguem uma ordem diferente da adotada nas tentativas de região de confiança. Nas tentativas do tipo região de confiança, inicialmente encontra-se qual ponto deve entrar no conjunto interpolador ($x^k + d^k$) e depois, qual deve sair do conjunto. Já nas alternativas primeiro é determinado qual ponto deve sair do conjunto interpolador para depois determinar qual deve entrar.

A escolha de qual ponto deve sair do conjunto durante uma tentativa alternativa é feita de duas formas diferentes, as quais são denominadas por escolha *alpha* e escolha

beta. As escolhas do tipo *alpha* maximizam o volume da envoltória convexa. Já as escolhas *beta* visam controlar os pontos que estão substancialmente longe do centro x^k da região. Depois que uma das escolhas *alpha* ou *beta* determina de forma diferenciada o ponto y_t que deve deixar o conjunto interpolador, se este ponto satisfizer as condições apresentadas adiante, a escolha do passo alternativo d^k é feita da mesma maneira, independente se y_t foi determinado por uma escolha *alpha* ou *beta*.

Inicialmente é apresentado como determinar o passo alternativo d^k e depois as particularidades na determinação do ponto que deve sair de P^k , lembrando que nas tentativas alternativas primeiro determina-se quem deve sair, para depois encontrar quem entra.

Condição 2.5 *Passo alternativo*

*Considere uma iteração k que realiza uma tentativa alternativa e suponha que o índice $t \in \{1, 2, \dots, n\}$ já tenha sido determinado por uma escolha do tipo *alpha* ou do tipo *beta*. O passo alternativo d^k é o vetor que maximiza o volume da envoltória convexa formada pelos pontos $\{y_0, \dots, y_n\} \setminus \{y_t\} \cup \{x^k + d^k\}$, desde que $\|d^k\| \leq \rho$.*

A direção do ponto d^k , escolhido conforme a Condição 2.5 a partir de $x^k = y_0$, nada mais é do que a direção ortogonal à face da envoltória convexa que tem como vértices os pontos y_i , para $i \in \{0, 1, \dots, n\} \setminus \{t\}$, e de tamanho ρ , conforme será ilustrado na próxima seção. A escolha do sentido do passo d^k é indiferente, mas a mais razoável é aquela em que $Q^k(x^k + d^k)$ assume o menor valor.

2.3.1 Alternativa tipo *alpha*

Nesta seção são definidas as condições necessárias para realizar uma iteração *alpha* de modo a estabelecer o ponto a deixar o conjunto interpolador para a próxima iteração. Para tal, convém definir uma variável para a distância de cada ponto interpolador ao hiperplano que contém os demais.

Definição 2.6 *Dada a k -ésima iteração, considere $\mathcal{H}_i^k \subset \mathbb{R}^n$ o hiperplano que contém os pontos interpoladores y_j , com $y_j \in P^k$ para $j \in \{0, 1, \dots, n\} \setminus \{i\}$. Define-se por σ_i a distância de y_i ao hiperplano \mathcal{H}_i^k , para $i \in \{1, 2, \dots, n\}$.*

Observe que os valores de σ_i , para $i \in \{0, 1, \dots, n\}$, variam de acordo com a iteração, porém os índices são omitidos para facilitar a notação. Note também que $y_i \notin \mathcal{H}_i^k$, pois do contrário o volume do *simplex* formado pelo conjunto de pontos $\{y_0, y_1, \dots, y_n\}$ seria nulo, o que contradiz o fato dos pontos interpoladores serem afim-independentes.

O objetivo de uma tentativa *alpha* é maximizar o volume da envoltória convexa. Deste modo, o índice do menor valor de σ_i , para $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, é escolhido para que o ponto correspondente y_i não entre no novo conjunto interpolador. Observe que esta escolha é significativa, uma vez que deseja-se maximizar o volume da envoltória convexa e a substituição de y_t por $x^k + d^k$ durante uma escolha *alpha* multiplica o volume da envoltória convexa por ρ/σ_t , conforme Lema 1.11 onde $h = \sigma_t$, $h^+ = \rho$ e A e A^+ são constituídas dos pontos de P^k e P^{k+1} , respectivamente, seguidos de 1.

Deste modo, o ponto y_t candidato a não entrar no conjunto P^{k+1} é o ponto que tem a menor distância σ_t . Em outras palavras, é o ponto y_t cujo índice t satisfaz as seguintes condições

$$\sigma_t \leq \sigma_i, \quad (2.18)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$, onde os valores de σ_i são as distâncias conforme Definição 2.6. Por outro lado, se σ_t é substancialmente grande não é necessária fazer essa substituição, uma vez que a cada mudança no conjunto interpolador uma nova avaliação na função objetivo é necessária. Assim, a escolha do índice do ponto que não vai pertencer ao novo conjunto interpolador por uma escolha *alpha* é descrita pela condição a seguir:

Condição 2.7 *Ponto a deixar o conjunto interpolador numa iteração alpha*
 O ponto $y_t \in P^k$ não entrará no conjunto interpolador P^{k+1} durante uma tentativa alternativa com escolha *alpha* somente se sua respectiva distância σ_t satisfazer (2.18) e

$$\sigma_t < \alpha\rho. \quad (2.19)$$

Caso a desigualdade acima não seja satisfeita, a tentativa alternativa *alpha* é terminada e tenta-se outra tentativa sem incrementar a iteração, já que não houve avaliação da função objetivo. Por outro lado, se for aceita o ponto y_t é substituído por $x^k + d^k$, onde d^k é um passo alternativo determinado conforme a Condição 2.5. Além disso, a tentativa passa a ser caracterizada como uma iteração *alpha*, o número da iteração é incrementado e se t é um elemento do conjunto \mathcal{B} , então $\mathcal{B} \leftarrow \mathcal{B} \setminus \{t\}$.

A condição acima mostra o propósito do parâmetro $\alpha \in (0, 1)$, uma vez que se o passo estiver substancialmente próximo da fronteira de região, então não é preciso alterar o conjunto interpolador. Já a razão para o parâmetro τ_α é que, se τ_α tentativas de região de confiança são realizadas desde a última tentativa alternativa *alpha* com o mesmo raio, então antes de uma próxima tentativa de região de confiança deve-se tentar uma etapa *alpha*.

Para melhor esclarecimento desta tentativa suponha que, como anteriormente, deseja-se minimizar localmente uma função $F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ e que os pontos interpoladores $y_0, y_1, y_2 \in \mathbb{R}^2$ ao longo de alguma iteração estejam dispostos conforme Figura 2.3, onde ρ é o raio considerado nesta tentativa. Ao longo desta tentativa são calculados os valores σ_1 e σ_2 , conforme Definição 2.6, onde para este caso específico tem-se a Figura 2.4.

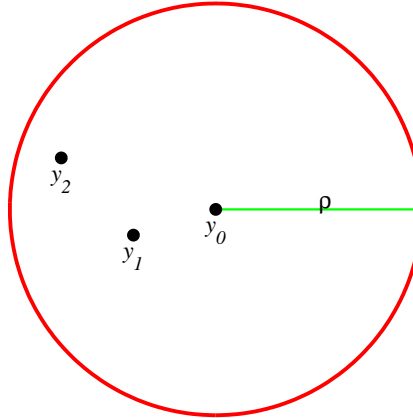


Figura 2.3: Pontos interpoladores durante uma iteração qualquer.

De acordo com a desigualdade (2.18) sabe-se que o índice candidato a não entrar no conjunto P^{k+1} é $t = 1$. Suponha que σ_1 satisfaça a Condição 2.7. Assim, determina-se o passo alternativo d^k , conforme a Condição 2.5, e escolhe-se entre os dois pontos apresentados na Figura 2.5, aquele que fornece o menor valor do modelo.

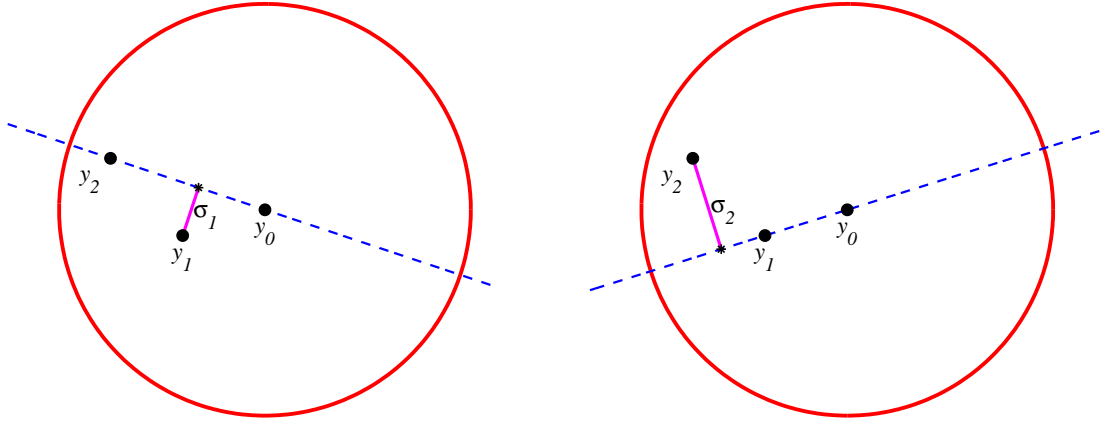


Figura 2.4: Distâncias σ_1 e σ_2 para os pontos y_1 e y_2 , respectivamente, da Figura 2.3 calculados numa tentativa *alpha*.

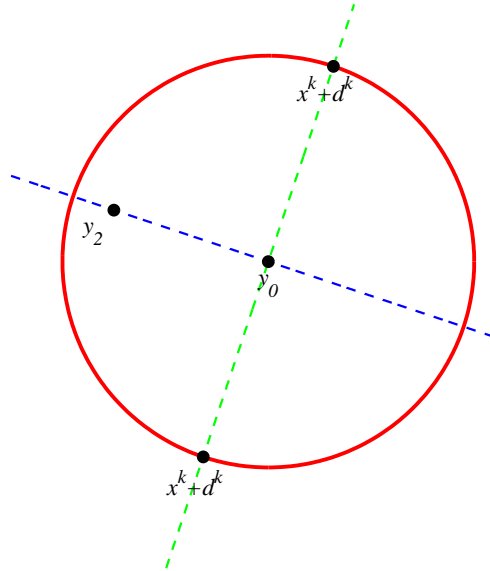


Figura 2.5: As duas possibilidades de passos alternativos para a Figura 2.4.

Sequencialmente obtém-se o novo conjunto interpolador P^{k+1} satisfazendo (2.4), atualiza-se o ponto x^{k+1} conforme (2.5), escolhe-se G^{k+1} e encontra-se o modelo Q^{k+1} segundo as condições de interpolação. Finalmente incrementa-se o contador da iteração.

2.3.2 Alternativa tipo *beta*

Nesta etapa, a escolha do índice $t \in \{1, 2, \dots, n\}$ que indica o ponto $y_t \in P^k$ que não entrará em P^{k+1} é feita de modo a impedir a dispersão dos pontos interpoladores. Porém, a escolha de t nem sempre é o inteiro que fornece a maior distância $\|y_i - x^k\|$, para $i = 1, 2, \dots, n$. Isto decorre do fato de que são considerados apenas os índices que pertencem ao conjunto \mathcal{B} , como apresentado depois da Condição 2.3. Essa restrição é útil para impor alteração no raio, como se discute adiante.

Se uma escolha *beta* está em consideração e $\mathcal{B} \neq \emptyset$, então o índice t é o elemento de \mathcal{B} que satisfaz

$$\|y_t - x^k\| \geq \|y_i - x^k\|, \quad (2.20)$$

para todo $i \in \mathcal{B}$. Por outro lado, se o elemento y_t solução de (2.20) for tal que $\|y_t - x^k\|$ seja substancialmente próximo do raio ρ , não é necessário retirá-lo do conjunto. Assim, a determinação de t por uma escolha *beta* é feita da seguinte forma:

Condição 2.8 *Ponto a deixar o conjunto interpolador numa iteração beta*

Considere t o índice que satisfaz (2.20). O ponto $y_t \in P^k$ não entrará no conjunto interpolador P^{k+1} somente se

$$\mathcal{B} \neq \emptyset \quad e \quad \|y_t - x^k\| > \beta\rho, \quad (2.21)$$

onde y_t é uma solução de (2.20), para $t \in \mathcal{B}$. Além disso, se (2.21) é satisfeita, então $\mathcal{B} \leftarrow \mathcal{B} \setminus \{t\}$.

Se (2.21) é satisfeita, então encontra-se o passo alternativo d^k conforme Condição 2.5, o ponto $x^k + d^k$ entra no conjunto P^{k+1} de modo a satisfazer (2.4), a tentativa passa a ser considerada como um iteração *beta* e o contador do número de iterações é incrementado. Por outro lado, se não for satisfeita, considera-se este passo como uma tentativa *beta* de insucesso, não se incrementa o índice da iteração e realiza-se outra tentativa.

Observe a razão para $\beta > 1$ na condição acima, afinal se o ponto estiver substancialmente perto da fronteira da região não é necessária uma alteração nos pontos interpoladores. O propósito para o parâmetro τ_β é, se desde a última tentativa *beta* são realizadas τ_β tentativas de região de confiança sem alteração no raio, então o processo alternativo com escolha *beta* deve ser aplicado antes de uma próxima tentativa de região de confiança.

A próxima condição define as exigências para que ocorra uma diminuição no raio da região de confiança. Salienta-se que durante este método não é permitido que o raio aumente.

Condição 2.9 *Redução do raio da região de confiança*

A alteração no raio da região de confiança ocorre sempre que uma tentativa de região de confiança é mal sucedida, conforme Condição 2.3, e que a próxima tentativa beta, antes da próxima de região de confiança, não altera os pontos interpoladores. Essa redução é feita por um fator de 10. Caso contrário o raio permanece o mesmo.

Em outras palavras, o raio reduz se durante uma tentativa de região de confiança uma das condições (2.13) ou (2.21) não é satisfeita e se antes da próxima tentativa de região de confiança realiza-se uma tentativa *beta* em que pelo menos uma das condições de (2.21) não vale. Note que a redução do raio da região de confiança só ocorre depois de uma tentativa alternativa *beta* de insucesso. Além disso, como essa tentativa foi de insucesso e, conseqüentemente, não houve avaliação na função objetivo, um outro tipo de tentativa é realizada na mesma iteração utilizando o novo raio. Deste modo, como ν recebe o índice da primeira iteração que considera um raio novo, este é também o índice da iteração em que o raio foi alterado.

Suponha como exemplo que, como antes, deseja-se resolver o problema (2.1) com $n = 2$ e que os pontos interpoladores $y_0, y_1, y_2 \in \mathbb{R}^2$ ao longo de alguma iteração estejam dispostos conforme Figura 2.6, onde ρ é o raio considerado nesta tentativa. Suponha também que $\mathcal{B} = \{1, 2\}$.

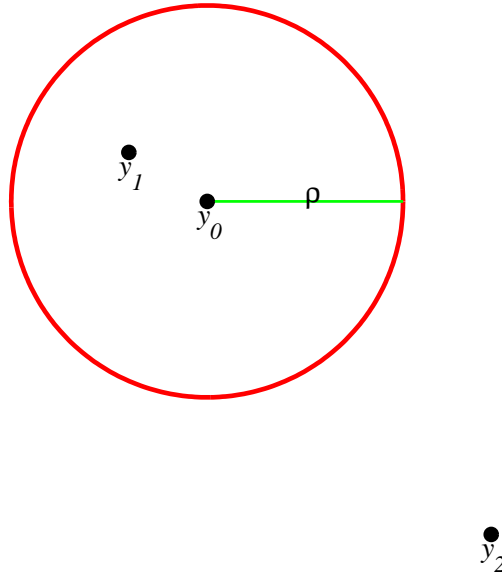


Figura 2.6: Pontos interpoladores durante uma iteração qualquer.

Durante esta tentativa, primeiramente são calculadas as distâncias de cada ponto interpolador ao centro da região. Note que o candidato a não entrar no novo conjunto interpolador P^{k+1} é o ponto y_2 que está mais distante de y_0 . Suponha, que este satisfaz Condição 2.8. Assim, calcula-se o passo alternativo d^k conforme Condição 2.5 obtendo a Figura 2.7 e escolhe-se a direção que fornece o menor valor do modelo. Deste modo,

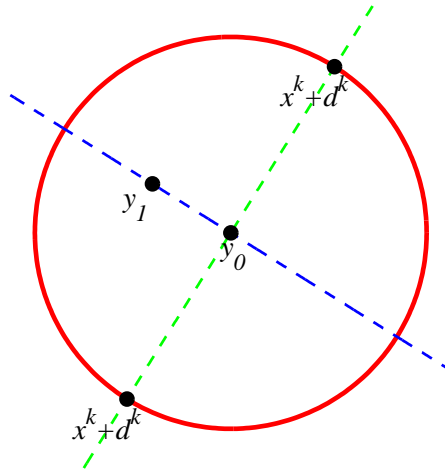


Figura 2.7: Possibilidades de passos alternativos para a Figura 2.6 numa iteração alternativa *beta*.

obtem-se o novo conjunto interpolador P^{k+1} de modo a satisfazer (2.4). Atualiza-se o ponto x^{k+1} , conforme (2.5). Escolhe-se G^{k+1} e encontra-se o modelo Q^{k+1} segundo as condições de interpolação. Finalmente incrementa-se k .

2.4 Exigências gerais

Recorde que a cada iteração uma avaliação na função objetivo é computada. Isto ocorre nas tentativas alternativas de sucesso, onde $F(x^k + d^k)$ é calculado se as condições (2.19) e (2.21) são satisfeitas, onde são realizadas tentativas *alpha* e *beta*, respectivamente; assim como nas tentativas de região de confiança que têm as condições apresentadas em (2.12) satisfeitas. Consequentemente, mais que um tipo de tentativa pode ser realizada em uma iteração. Deste modo, sempre que menciona-se uma **iteração** *alpha* ou *beta*, isso significa que a última tentativa realizada nesta iteração foi de sucesso e do tipo *alpha* ou *beta*, respectivamente. Isso não ocorre para as iterações de região de confiança, pois a avaliação de F no novo ponto pode ocorrer, caso em que (2.12) é satisfeita, e por outro lado não ser de sucesso, caso em que (2.13) não é satisfeita.

Ao longo do algoritmo as tentativas do tipo região de confiança são as preferidas, portanto existe a exigência de que entre duas tentativas consecutivas de região de confiança com o mesmo raio deve existir no máximo uma tentativa *alpha* e uma *beta*. Além disso, depois de cada etapa de região de confiança com passo mal sucedido, conforme Condição 2.3, é obrigatória uma tentativa alternativa *beta* antes de uma tentativa de região de confiança, de modo a melhorar a disposição dos pontos interpoladores, ou então reduzir o raio caso seja necessário. Mais ainda, a primeira e a segunda tentativa com cada novo raio da região de confiança são do tipo alternativa *alpha* e região de confiança, respectivamente.

Até agora considerou-se que a Hessiana G^{k+1} do novo modelo Q^{k+1} era uma matriz simétrica uniformemente limitada arbitrária. Porém existe uma situação razoável onde G^{k+1} não pode ser escolhida arbitrariamente, que está intimamente relacionada com a necessidade de um passo de região de confiança ser exato. Essa situação ocorre quando $k \geq \nu + 5$ e $\eta^{k+1} = 0$. Neste caso define-se $G^{k+1} = G^k$ e pela definição de η^{k+1} tem-se $Q^k(x^k + d^k) = F(x^k + d^k)$. Por outro lado, da condição de interpolação (2.8) sabe-se que a liberdade em Q^{k+1} é dada pela matriz G^{k+1} . Deste modo, a escolha $G^{k+1} = G^k$ garante que $Q^{k+1} \equiv Q^k$, em outras palavras, o modelo anterior é mantido.

2.5 Algoritmo e suas propriedades

Finalmente, é apresentado nesta seção o algoritmo que abrange as propriedades descritas até então e resolve o problema (2.1) sem utilizar as derivadas da função objetivo. Na sequência, são apresentados alguns resultados decorrentes do algoritmo. Prova-se para este algoritmo a convergência global, a qual é estabelecida no Capítulo 4.

Procura-se nesta seção expor de forma explícita o algoritmo discutido por Powell em [17]. Antes porém, convém apresentar algumas variáveis auxiliares utilizadas no algoritmo, são essas: c_α , c_β , rci , aux_ν , c_{τ_α} e c_{τ_β} . As variáveis c_α e c_β são binárias e cada uma assume o valor 1 apenas quando uma tentativa *alpha* e uma tentativa *beta* é realizada, respectivamente. A variável binária rci só assume o valor 1 quando uma tentativa de região de confiança é de insucesso. Já aux_ν vale 0, 1 ou 2. A variável aux_ν assume o valor 1 quando o raio muda. A partir do momento que o algoritmo realiza a primeira tentativa *alpha* essa passa a valer 2 e depois que uma tentativa *beta* é realizada ela assume o valor 0. A variável c_{τ_α} conta o número de tentativas de região de confiança realizadas entre duas tentativas *alpha* consecutivas com o mesmo raio. Analogamente para c_{τ_β} que conta as tentativas de região de confiança entre duas *beta* consecutivas de raio constante.

Algoritmo 2.1

Dados: $y_0, y_1, \dots, y_n \in \mathbb{R}^n$; $G^1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$; $\rho, \gamma > 0$; $\alpha \in (0, 1)$; $\beta > 1$; $\tau_\alpha, \tau_\beta \in \mathbb{N}$;

Inicialização:

$c_{\tau_\alpha} = c_{\tau_\beta} = c_\alpha = c_\beta = rci = \eta^1 = 0$; $\mathcal{B} = \{1, 2, \dots, n\}$; $k = \nu = aux_\nu = 1$;

Determine o modelo Q^1 ;

Reordene os pontos $y_0, y_1, \dots, y_n \in \mathbb{R}^n$ de modo a satisfazerem (2.4);

REPITA enquanto $\rho \neq 0$

Se ($c_{\tau_\alpha} \neq \tau_\alpha$, $c_{\tau_\beta} \neq \tau_\beta$, $aux_\nu \neq 1$ e $rci = 0$), então (tentativa de RC)

$c_{\tau_\alpha} = c_{\tau_\alpha} + 1$; $c_\alpha = 0$; $c_\beta = 0$;

Se ($aux_\nu \neq 2$), então ($c_{\tau_\beta} = c_{\tau_\beta} + 1$);

Se ($k \neq \nu$), então

$\eta^k = \max \{ |Q^j(x^j + d^j) - F(x^j + d^j)| : j = \nu, \nu + 1, \dots, k - 1 \}$;

Se ($k \geq \nu + 5$ e $\eta^k = 0$), então Encontre d^k solução exata do problema (2.9);

Senão Encontre d^k satisfazendo (2.10);

Se ($Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) > \gamma \eta^k$ e $\|d^k\| \geq \frac{1}{2}\rho$), então

Calcule $F(x^k + d^k)$;

Se $F(x^k) - F(x^k + d^k) \geq 0.1 \{ Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \}$, então RC ★

$t = \operatorname{argmax} \{ |\theta_i| : i = 1, 2, \dots, n \}$, com θ_i satisfazendo (2.14) e (2.15);

$x^{k+1} = x^k + d^k$; $y_0 = x^{k+1}$; $y_t = x^k$;

$\mathcal{B} = \{1, 2, \dots, n\}$; Determine o modelo Q^{k+1} ;

Senão $rci = 1$; $x^{k+1} = x^k$; $Q^{k+1} = Q^k$; RC X

$k = k + 1$;

Senão $rci = 1$; RC X

Senão

Se ($c_\alpha = 0$), então (tentativa alpha)

$c_\alpha = 1$; $c_{\tau_\alpha} = 0$; Se ($aux_\nu = 1$), então ($aux_\nu = 2$);

$t = \operatorname{argmin} \{ \sigma_i : i = 1, 2, \dots, n \}$, com σ_i segundo Definição 2.6;

Se ($\sigma_i < \alpha \rho$), então α ★

Encontre d^k conforme Propriedade 2.5 e Calcule $F(x^k + d^k)$;

Se $F(x^k + d^k) < F(x^k)$, então $x^{k+1} = x^k + d^k$; $y_0 = x^{k+1}$; $y_t = x^k$

Senão $x^{k+1} = x^k$; $y_t = x^k + d^k$;

Calcule η^k conforme (2.11); Determine o modelo Q^{k+1} ;

$k = k + 1$; $\mathcal{B} = \mathcal{B} \setminus \{t\}$;

Senão

Se ($c_\beta = 0$), então (tentativa beta)

$c_\beta = 1$; $c_{\tau_\beta} = 0$; Se ($aux_\nu = 2$), então ($aux_\nu = 0$);

Se ($\mathcal{B} \neq \emptyset$), então ($t = \operatorname{argmax} \{ \|y_i - x^k\| : i \in \mathcal{B}\} \}$) Senão $t = 0$;

Se ($\|y_t - x^k\| > \beta \rho$), então β ★

Encontre d^k conforme Propriedade 2.5 e Calcule $F(x^k + d^k)$;

Se $F(x^k + d^k) < F(x^k)$, então $x^{k+1} = x^k + d^k$; $y_0 = x^{k+1}$; $y_t = x^k$

Senão $x^{k+1} = x^k$; $y_t = x^k + d^k$

Calcule η^k conforme (2.11); Determine o modelo Q^{k+1} ;

$k = k + 1$; $\mathcal{B} = \mathcal{B} \setminus \{t\}$

Senão β X

Se $rci = 1$, então

$\rho = 0.1 \rho$; $aux_\nu = 1$; $\mathcal{B} = \{1, 2, \dots, n\}$;

$c_{\tau_\alpha} = c_{\tau_\beta} = c_\alpha = c_\beta = 0$; $\nu = k$;

$rci = 0$;

FIM.

A seguir apresentam-se alguns resultados decorrentes do Algoritmo 2.1, os quais garantem que as descrições e exigências descritas anteriormente sobre o método são satisfeitas.

- R1** A sequência $(F(x^k))_{k \in \mathbb{N}}$ gerada pelo algoritmo é monótona não crescente.
- R2** Depois do comando *REPITA*, as três condições a serem satisfeitas são denominadas de: tentativa de região de confiança, tentativa alpha e tentativa beta. Cada tentativa é sucesso se a linha que contém o caracter \star é satisfeita e então, essa é considerada uma iteração e o valor de k é incrementado, caso contrário, essa é considerada uma tentativa de insucesso e o valor de k não muda. **Exceto** se durante uma tentativa de região de confiança o valor de $F(x^k + d^k)$ seja calculado, neste caso incrementa-se k mesmo que a tentativa seja de insucesso.
- R3** Os comandos identados ao caracter \star são realizados para uma iteração de sucesso, já ao \mathbf{X} são os realizados caso a tentativa seja de insucesso.
- R4** Sempre que a função objetivo é avaliada em um novo ponto, a iteração é incrementada.
- R5** Uma tentativa de região de confiança é mal sucedida, quando não se calcula $F(x^k + d^k)$ ou $\text{ared} < 0.1$ pred e neste caso, rci se torna 1.
- R6** Várias iterações de região de confiança seguidas são realizadas até que, ou c_{τ_α} atinja τ_α , ou c_{τ_β} seja igual a τ_β , ou ainda a última seja uma tentativa mal sucedida e assim rci assume o valor 1.
- R7** Após uma tentativa de região de confiança mal sucedida, realiza-se uma tentativa alpha e depois uma beta antes da próxima tentativa de região de confiança.
- R8** O raio da região de confiança diminui quando uma tentativa de região de confiança é mal sucedida e a tentativa beta antes da próxima tentativa de região de confiança também é de insucesso. A redução ocorre numa tentativa beta de insucesso.
- R9** A primeira e a segunda tentativas depois de cada alteração no raio são sempre do tipo alpha e região de confiança, respectivamente.
- R10** Entre duas tentativas de região de confiança com o mesmo raio são realizadas no máximo uma tentativa alpha e uma beta.
- R11** Entre duas tentativas alpha consecutivas com o mesmo raio são feitas no máximo τ_α iterações de região de confiança. Quando c_{τ_α} atinge τ_α , o algoritmo realiza uma tentativa alpha e depois volta a fazer tentativas de região de confiança.
- R12** Entre duas tentativas beta consecutivas com o mesmo raio realiza-se no máximo τ_β iterações de região de confiança. Quando c_{τ_β} atinge τ_β , o algoritmo realiza uma tentativa alpha, uma tentativa beta e depois volta a fazer tentativas região de confiança.
- R13** O conjunto \mathcal{B} é preenchido com os números $\{1, 2, \dots, n\}$ durante uma iteração de região de confiança bem sucedida ou numa tentativa beta que altera o tamanho do raio.

R14 *Retira-se um elemento do conjunto \mathcal{B} nas iterações alpha e beta, ou seja, quando as tentativas alpha ou beta são de sucesso.*

R15 *Quando $\eta^k = 0$ e $k \geq \nu + 5$, o modelo não é alterado para a próxima iteração, ou seja, $Q^{k+1} = Q^k$.*

O próximo resultado estabelece uma estimativa máxima para a quantidade de iterações realizadas entre duas tentativas *beta* de mesmo raio.

Lema 2.10 *Entre duas tentativas consecutivas do tipo beta com o mesmo raio da região de confiança, existem no máximo $2\tau_\beta + 1$ iterações.*

Demonstração.

Fixadas duas tentativas *beta* consecutivas que consideram o mesmo raio sabe-se com o resultado R12 que, entre duas tentativas *beta* com o mesmo raio ocorre no máximo τ_β tentativas de região de confiança. Consequentemente tem-se no máximo τ_β iterações de região de confiança entre as duas *beta*, caso em que todas essas tentativas de região de confiança avaliam a função objetivo no ponto obtido. Além disso, entre cada par de iterações de região de confiança há no máximo uma tentativa *alpha*, segundo resultado R10.

Como não há restrições para a quantidade de iterações do tipo *alpha* entre duas tentativas *beta*, pode-se ainda incluir uma *alpha* logo após a primeira *beta* e outra antes da última *beta*. Como procura-se o máximo, assume-se que as tentativas *alpha* são todas de sucesso. A Figura 2.8 ilustra este argumento.

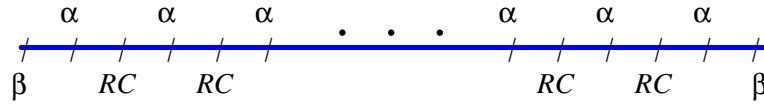


Figura 2.8: Sequência de iterações entre duas tentativas *beta*.

Desta maneira, tem-se no máximo τ_β iterações de região de confiança e $\tau_\beta + 1$ iterações *alpha* entre as duas tentativas consecutivas *beta* com o raio constante, o que conclui a demonstração. □

Note que todas as iterações de região de confiança apresentadas na Figura 2.8 são bem sucedidas com exceção da última, uma vez que sempre que uma tentativa de região de confiança é mal sucedida deve haver uma tentativa alternativa *beta* antes da próxima tentativa de região de confiança.

Garante-se no próximo lema que existe uma tentativa de região de confiança bem sucedida, conforme Condição 2.2, num determinado número de iterações consecutivas com um raio constante.

Lema 2.11 [17, pág. 13] *A cada série de $3n + 3$ iterações consecutivas sem redução no raio, pelo menos uma dessas iterações é uma iteração de região de confiança bem sucedida.*

Demonstração.

Considere p e q os índices de duas iterações com $p < q$ de modo que, para todas as tentativas realizadas entre p e q inclusive, o raio seja constante e todas as tentativas de região de confiança sejam mal sucedidas. Desta maneira, basta demonstrar que $q - p \leq 3n + 1$. Note que $q \geq p + 4$ pois, do contrário, o número de iterações entre p e q inclusive seria $q - p + 1 < 5$, o que é menor que $3n + 3$, e neste caso não há nada a provar.

De acordo com os resultados R7 e R10 tem-se que entre p e q as três possíveis tentativas consecutivas são, região de confiança - *alpha* - *beta*, *alpha* - *beta* - região de confiança, *beta* - região de confiança - *alpha* e *alpha* - região de confiança - *alpha*, onde a última sequência só ocorre quando a primeira tentativa é realizada na iteração de índice p . Consequentemente, a cada 3 iterações consecutivas entre $p + 2$ e q inclusive, realiza-se pelo menos uma tentativa de região de confiança e uma *beta*. Já para as três primeiras iterações, incluem pelo menos uma tentativa de região de confiança. Desta forma, como a tentativa mais recente de região de confiança anterior à de índice k , para $p + 3 \leq k \leq q$, foi de insucesso, todas as tentativas *beta* nas iterações de $p + 3$ a q são de sucesso, pois do contrário o raio diminuiria.

Por outro lado, como para as iterações entre p e q inclusive as tentativas de região de confiança são mal sucedidas e não há redução no raio, tem-se pelo resultado R13 que a cardinalidade do conjunto \mathcal{B} ($|\mathcal{B}|$) decresce monotonicamente durante essas iterações. Além disso, no início da iteração de índice $p + 3$, tem-se que $|\mathcal{B}|$ é no máximo $n - 1$, uma vez que houve pelo menos uma iteração *alpha* ou *beta* até a iteração $p + 3$.

Já para as demais iterações até a de índice q tem-se que a cardinalidade de \mathcal{B} é reduzida de 1, no mínimo sempre que um passo *beta* é realizado, pois todos são de sucesso. Desta forma, como para uma tentativa *beta* ser de sucesso é necessário que o conjunto \mathcal{B} seja diferente de vazio e como no início da iteração $p + 3$ tem-se $|\mathcal{B}| \leq n - 1$, conclui-se que essa redução ocorre no máximo $n - 1$ vezes para $p + 3 \leq k \leq q$. Além disso, como a cada três iterações incluem pelo menos uma iteração *beta*, tem-se que o número de iterações que não são do tipo *beta* é no máximo $2n$. Desta forma, obtém-se que o total de iterações de $p + 3$ a q inclusive, é no máximo $3n - 1$ e o resultado está demonstrado.

□

Capítulo 3

Propriedades do Conjunto Interpolador

Para estabelecer a convergência global do Algoritmo 2.1 convém estabelecer anteriormente alguns resultados do conjunto interpolador P^k , definido em (2.2), os quais são discutidos ao longo deste capítulo.

Lema 3.1 [17, (4.2)] *Seja P^k e P^{k+1} os conjuntos interpoladores no início e no final da k -ésima iteração como definidos em (2.2) e (2.3), respectivamente e ρ o raio da região de confiança considerado nesta iteração. Se o passo d^k é aceito, então para todo $i = 0, 1, \dots, n$ tem-se*

$$\|y_i^+ - y_0^+\| \leq \|y_i - y_0\| + \rho. \quad (3.1)$$

Demonstração.

De acordo com o Algoritmo 2.1 sabe-se que os conjuntos P^k e P^{k+1} diferem ou em apenas um elemento, caso em que $y_t^+ = x^k + d^k$; ou em dois elementos $y_t^+ = y_0$ e $y_0^+ = x^k + d^k$. Em ambos os casos, como $x^k = y_0$ e $\|d^k\| \leq \rho$, tem-se

$$\|y_t^+ - y_0^+\| = \|d^k\| \leq \rho \leq \rho + \|y_t - y_0\|. \quad (3.2)$$

Além disso,

$$\|y_0^+ - y_0\| = \begin{cases} \|y_0 - y_0\| = 0 \leq \rho, & \text{se } y_0^+ = y_0, \\ \|x^k + d^k - y_0\| = \|d^k\| \leq \rho, & \text{se } y_0^+ = x^k + d^k. \end{cases} \quad (3.3)$$

Para $i \in \{1, 2, \dots, n\} \setminus \{t\}$, tem-se $y_i^+ = y_i$. Logo aplicando a desigualdade triangular e usando (3.3) obtém-se

$$\begin{aligned} \|y_i^+ - y_0^+\| &\leq \|y_i^+ - y_i\| + \|y_i - y_0\| + \|y_0 - y_0^+\| \\ &\leq \|y_i - y_0\| + \rho, \end{aligned} \quad (3.4)$$

completando a demonstração. □

A próxima propriedade garante que as iterações de região de confiança mantêm a linearidade afim dos pontos interpoladores. Antes de enunciá-la são ressaltados alguns resultados e definidas algumas matrizes auxiliares.

Primeiramente, salienta-se que os pontos interpoladores variam no decorrer das iterações, porém seus índices são omitidos para facilitar a notação. Além disso, dada uma iteração k tem-se que $y_0 = y_0^k = x^k$. Mais, sabe-se que o conjunto P^k é determinado de modo a maximizar o volume da envoltória convexa, conforme Definição 1.10, ou em pelo menos manter a independência linear dos pontos $\{y_1 - y_0, y_2 - y_0, \dots, y_n - y_0\}$.

Em uma dada iteração k associa-se ao conjunto P^k , conforme descrito em (2.2), as matrizes Y^k e D^k de dimensões $n \times n$ e $(n+1) \times (n+1)$, respectivamente, dadas por

$$Y^k = (y_1 - y_0, y_2 - y_0, \dots, y_n - y_0) \quad (3.5)$$

e

$$D^k = \begin{pmatrix} y_0 & y_1 & \cdots & y_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

A matriz D^k possui algumas propriedades específicas que discute-se ao longo desta seção.

Inicialmente, uma relação é estabelecida para o determinante da matriz D^k . Para tanto, observe que ao subtrair a primeira coluna das demais apenas operações elementares são realizadas, consequentemente o determinante de D^k não se altera. Mais formalmente, tem-se que,

$$\det D^k = \begin{vmatrix} y_0 & y_1 & \cdots & y_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} y_0 & y_1 - y_0 & \cdots & y_n - y_0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \end{vmatrix}$$

Ao resolver o determinante por cofatores com base na última linha do resultado acima [9], tem-se

$$\det D^k = (-1)^{(n+1)+1} \begin{vmatrix} y_1 - y_0 & \cdots & y_n - y_0 \end{vmatrix} = (-1)^n \det(Y^k).$$

Deste modo,

$$|\det D^k| = |\det Y^k|. \quad (3.7)$$

Portanto, como os pontos $\{y_0, y_1, \dots, y_n\}$ são afim-independentes, tem-se que o determinante de Y^k é não nulo, consequentemente a matriz D^k é não-singular para todo $k \in \mathbb{N}$.

Para o próximo lema ressalta-se a base geral de uma iteração k de região de confiança bem sucedida. Primeiramente sabe-se que como ela é de sucesso, o ponto $x^k + d^k$ é aceito e deste modo os valores θ_i , para $i = \{0, 1, \dots, n\}$, são calculados de modo a satisfazerem as igualdades (2.14) e (2.15). Em seguida, escolhe-se o índice t que satisfaz (2.17) e indica o ponto $y_t \in P^k$ que não entrará o conjunto interpolador P^{k+1} . Com essa abordagem, o resultado seguinte estabelece uma relação entre os determinantes das matrizes D^k e D^{k+1} , onde a matriz D^{k+1} é a matriz D^k cujo ponto y_t é substituído por $x^k + d^k$. Mais formalmente, pode-se escrever a matriz D^{k+1} da seguinte maneira,

$$D^{k+1} = \begin{pmatrix} x^k + d^k & y_1 & \cdots & y_{t-1} & y_0 & y_{t+1} & \cdots & y_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

De fato, como a iteração é de região de confiança e de sucesso, o ponto $x^k + d^k$ fornece um valor na função objetivo menor que y_0 .

Lema 3.2 [17, (3.9)] *Dada uma iteração k de região de confiança bem sucedida, considere as matrizes D^k e D^{k+1} como descritas em (3.6) e (3.8), respectivamente. Assim,*

$$|\det D^{k+1}| = |\theta_t| |\det D^k|. \quad (3.9)$$

Demonstração.

Como uma iteração de região de confiança foi realizada com sucesso, tem-se que $x^k + d^k$ pode ser escrito como em (2.14), onde os valores de θ_i satisfazem (2.15), para $i \in \{0, 1, \dots, n\}$. Por outro lado, como é considerado o determinante em módulo troca-se as colunas de índices 0 e t . Desta maneira, obtém-se

$$|\det D^{k+1}| = \begin{vmatrix} y_0 & y_1 & \cdots & \sum_{i=0}^n \theta_i y_i & \cdots & y_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & \cdots & 1 \end{vmatrix}$$

Subtraindo da t -ésima coluna a primeira coluna multiplicada por θ_0 , obtém-se

$$|\det D^{k+1}| = \begin{vmatrix} y_0 & y_1 & \cdots & \sum_{i=0}^n \theta_i y_i - \theta_0 y_0 & \cdots & y_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 - \theta_0 & \cdots & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} y_0 & \cdots & \sum_{i=1}^n \theta_i y_i & \cdots & y_n \\ 1 & \cdots & 1 - \theta_0 & \cdots & 1 \end{vmatrix}.$$

Analogamente para as demais colunas, ou seja, subtraindo da t -ésima coluna θ_i vezes a i -ésima coluna, para $i \in \{1, 2, \dots, n\} \setminus \{t\}$, tem-se

$$|\det D^{k+1}| = \begin{vmatrix} y_0 & y_1 & \cdots & \theta_t y_t & \cdots & y_n \\ 1 & 1 & \cdots & \left(1 - \sum_{i=0, i \neq t}^n \theta_i\right) & \cdots & 1 \end{vmatrix}.$$

Por (2.15), sabe-se que $1 - \sum_{i=0, i \neq t}^n \theta_i = \theta_t$, consequentemente

$$|\det D^{k+1}| = \begin{vmatrix} y_0 & \cdots & \theta_t y_t & \cdots & y_n \\ 1 & \cdots & \theta_t & \cdots & 1 \end{vmatrix} = |\theta_t| \begin{vmatrix} y_0 & \cdots & y_t & \cdots & y_n \\ 1 & \cdots & 1 & \cdots & 1 \end{vmatrix} = |\theta_t| |\det D^k|,$$

o que conclui a prova. □

O Lema acima garante que um passo de região de confiança bem sucedido preserva a não-singularidade da matriz de interpolação, uma vez que como já mencionado, a condição (2.17) garante que $|\theta_t| > 0$. No próximo lema é apresentada a preservação da não-singularidade para uma iteração alternativa *alpha*.

Lema 3.3 [17, (3.3) e (3.4)] *Dada uma iteração k , considere σ_i as distâncias conforme Definição 2.6, para $i = 1, 2, \dots, n$. Se D^k é a matriz definida em (3.6), então pode-se estabelecer os limites*

$$\prod_{i=1}^n \sigma_i \leq |\det D^k| \leq \prod_{i=1}^n \|y_i - y_0\|. \quad (3.10)$$

Demonstração.

Para auxílio considere o vetor

$$s_1 = y_1 - y_0$$

e para $i \in \{2, 3, \dots, n\}$, os vetores

$$s_i = (y_i - y_0) - \sum_{j=1}^{i-1} \phi_{ij} (y_j - y_0),$$

onde para cada i fixado, o coeficiente ϕ_{ij} é a solução do problema

$$\min_{1 \leq j \leq i-1} \|s_i\|.$$

Cabe ressaltar que o conjunto de vetores $\{s_i : i = 1, 2, \dots, n\}$ definido desta maneira corresponde à ortogonalização de Gram-Schmidt do conjunto de vetores linearmente independentes $\{y_i - y_0 : i = 1, 2, \dots, n\}$. Assim, s_i é ortogonal a todos os vetores do subespaço linear de dimensão $(i-1)$ gerado pelos vetores $(y_j - y_0)$, para $j = 1, 2, \dots, (i-1)$ e contidos no \mathbb{R}^n , o qual fornece $s_i^T s_j = 0$, para $1 \leq j < i \leq n$.

Se a matriz Y^k definida em (3.5) for representada por $Y^k = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$, onde $Y_i = (y_i - y_0)$ e S^k for a matriz cujas colunas são os vetores s_i , para $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, então

$$S^k = (s_1 \ s_2 \ \dots \ s_n) = \left(Y_1 \ Y_2 - \phi_{21} Y_1 \ \dots \ Y_n - \sum_{j=1}^{n-1} \phi_{nj} Y_j \right).$$

Os índices k dos vetores y_i e s_i , para $i \in \{0, 1, \dots, n\}$, foram omitidos para facilitar a notação. É fácil ver que

$$\det S^k = \det Y^k. \quad (3.11)$$

Desta forma, como

$$(S^k)^T S^k = \begin{pmatrix} s_1^T s_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s_2^T s_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & s_n^T s_n \end{pmatrix}$$

é uma matriz diagonal, com base nas relações (3.7) e (3.11) obtém-se

$$|\det D^k| = |\det Y^k| = |\det S^k| = \left[(\det S^k)^2 \right]^{1/2} = (\det S^k \det S^k)^{1/2}.$$

Como $\det S^k = \det (S^k)^T$, tem-se

$$|\det D^k| = \left(\det (S^k)^T \det S^k \right)^{1/2} = \left(\det (S^k)^T S^k \right)^{1/2} = \prod_{i=1}^n \|s_i\|. \quad (3.12)$$

Por outro lado, como para cada i fixado, os valores de ϕ_{ij} , para $j = \{1, 2, \dots, i-1\}$, são determinados de modo a minimizar $\|s_i\|$, obtém-se

$$\|s_i\| = \left\| y_i - y_0 - \sum_{j=1}^{i-1} \phi_{ij} (y_j - y_0) \right\| \leq \|y_i - y_0\|.$$

Usando isto e (3.12), tem-se

$$|\det D^k| = \prod_{i=1}^n \|s_i\| \leq \prod_{i=1}^n \|y_i - y_0\|,$$

provando o limite superior de (3.10).

Para o limite inferior considere, para $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, os vetores descritos por

$$\widehat{s}_i = y_i - \left(y_0 + \sum_{j=1, j \neq i}^n \psi_{ij} (y_j - y_0) \right),$$

sendo ψ_{ij} os valores que minimizam $\|\widehat{s}_i\|$. Analogamente a s_i , pela difinição de ψ_{ij} tem-se

$$\begin{aligned} \|\widehat{s}_i\| &= \left\| y_i - \left(y_0 + \sum_{j=1, j \neq i}^n \psi_{ij} (y_j - y_0) \right) \right\| \\ &\leq \left\| y_i - \left(y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \phi_{ij} (y_j - y_0) + \sum_{j=i+1}^n \mathbf{0} (y_j - y_0) \right) \right\| \end{aligned}$$

Logo para todo $i \in \{1, 2, \dots, n\}$

$$\|\widehat{s}_i\| \leq \|s_i\|. \quad (3.13)$$

Observe também que

$$\widehat{s}_i = y_i - \left[\left(1 - \sum_{j=1, j \neq i}^n \psi_{ij} \right) y_0 + \sum_{j=1, j \neq i}^n \psi_{ij} y_j \right] = y_i - \bar{y}_i,$$

sendo \bar{y}_i uma combinação afim dos pontos $\{y_0, y_1, \dots, y_n\} \setminus \{y_i\}$, ou seja, um vetor que pertence ao hiperplano que contém os pontos y_j , para $j \in \{0, 1, \dots, n\} \setminus \{i\}$. Como $\|\widehat{s}_i\|$ é minimizada ao escolher os valores de ψ_{ij} , para $j \in \{1, 2, \dots, n\} \setminus \{i\}$, minimiza-se automaticamente a distância entre y_i e \bar{y}_i e assim, pela Definição 2.6 para cada $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ tem-se

$$\|\widehat{s}_i\| = \sigma_i.$$

Juntando este resultado com (3.12) e (3.13) tem-se

$$|\det D^k| = \prod_{i=1}^n \|s_i\| \geq \prod_{i=1}^n \sigma_i,$$

o que completa a prova. □

Note que como os pontos $\{y_0, y_1, \dots, y_n\}$ são afim-independentes, tem-se consequentemente que as distâncias σ_i , calculadas numa tentativas *alpha*, não são nulas. Deste modo, o resultado acima garante que uma iteração alternativa *alpha* mantém a não-singularidade da matriz de interpolação, como esperado.

Observe também que os Lemas 3.2 e 3.3 apresentam que a não-singularidade da matriz D^k segue nem sempre da maximização do volume da envoltória convexa utilizada nas iterações alternativas, como também pelos valores de σ_i e θ_i , calculados na iterações *alpha* e região de confiança, respectivamente, para $i = 0, 1, \dots, n$.

O próximo resultado estabelece uma limitação para a distância do ponto y_0 aos pontos y_i , tais que $i \in \mathcal{B}$ para $i = 1, 2, \dots, n$. Na demonstração deste lema são utilizados, por conveniência, os índices dos pontos interpoladores com base nas iterações.

Lema 3.4 *Dada uma iteração k , considere o conjunto \mathcal{B} no início da k -ésima iteração. Fixado um índice $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, suponha que $i \notin \mathcal{B}$ na iteração k . Então*

$$\|y_i - y_0\| \leq (3n + 2)\rho. \quad (3.14)$$

Demonstração.

Considere ℓ o índice da última iteração antes da k -ésima iteração em que o índice i deixou de pertencer ao conjunto \mathcal{B} . Assim, pelo resultado R14 tem-se que a iteração ℓ é alternativa e além disso, conclui-se que

- $\ell < k$
- $y_i^{\ell+1} = x^\ell + d^\ell$
- $\mathcal{B} \neq \{1, 2, \dots, n\}$ em todas as iterações de $\ell + 1$ até o início da iteração k .

Note que a segunda afirmativa poderia também ser

$$y_0^{\ell+1} = x^\ell + d^\ell \quad \text{e} \quad y_i^{\ell+1} = y_0^\ell,$$

mas isso pode ser desconsiderado, uma vez que o conjunto $P^{\ell+1}$ dos pontos interpoladores é o mesmo exceto pela ordem dos pontos. Já a última, é uma consequência direta da escolha de ℓ , a qual garante que $i \notin \mathcal{B}$ desde o final da ℓ -ésima iteração até o início da de índice k . Consequentemente, ao longo dessas iterações os raios de região de confiança não mudam e todas as tentativas de região de confiança são mal sucedidas, pois \mathcal{B} não foi preenchido.

Conforme o Lema 2.11 sabe-se que numa série de $3n + 3$ iterações de mesmo raio pelo menos uma delas é uma iteração de região de confiança bem sucedida. Como de ℓ até k todas as iterações de região de confiança foram mal sucedidas e ℓ é uma iteração alternativa, conclui-se que $k - \ell < 3n + 3$, ou ainda, que $k - \ell + 1 \leq 3n + 3$ e consequentemente,

$$\ell \geq k - 3n - 2. \quad (3.15)$$

Considere $\bar{\ell}$ tão grande quanto possível o índice de alguma iteração tal que, $\ell \leq \bar{\ell} < k$ e que em todas as iterações de índices $j \in \{\bar{\ell} + 1, \bar{\ell} + 2, \dots, k - 1\}$ os pontos de interpolação de índice i não se alterem, em outras palavras, que para $j = \bar{\ell} + 1, \bar{\ell} + 2, \dots, k - 1$ as condições abaixo sejam satisfeitas,

$$y_i^{\bar{\ell}} \neq y_i^{\bar{\ell}+1} \quad \text{e} \quad y_i^j = y_i^{j+1}.$$

Note que $\bar{\ell}$ está bem definido, uma vez que este é pelo menos $k - 1$, onde obtém-se $y_i^{k-1} \neq y_i^k$. Além disso, como $\ell \leq \bar{\ell} < k$, por (3.15) tem-se,

$$\bar{\ell} \geq k - 3n - 2. \quad (3.16)$$

Por outro lado, sabe-se que em todas as iterações de índices $(\bar{\ell} + 1, \bar{\ell} + 2, \dots, k - 1)$ os raios são iguais. Além disso, as únicas iterações que podem alterar os pontos y_i^j , para $j = \bar{\ell} + 1, \bar{\ell} + 2, \dots, k - 1$, são as tentativas do tipo *alpha*, uma vez que, todas as tentativas de região de confiança são mal sucedidas neste intervalo e se for do tipo *beta*, tem-se $y_i^{j+1} = y_i^j$, pois o índice i não pertence ao conjunto \mathcal{B} desde a iteração $\ell < \bar{\ell} + 1$. Desta maneira, prova-se que se $i \notin \mathcal{B}$ conclui-se que, para $j \in \{\bar{\ell} + 1, \bar{\ell} + 2, \dots, k\}$, vale

$$\|y_i^j - y_0^j\| \leq (j - \bar{\ell})\rho_j = (j - \bar{\ell})\rho_k. \quad (3.17)$$

De fato, prossegue-se a veracidade por indução, dado $j \in \{1, \dots, k - \bar{\ell}\}$ suponha a seguinte hipótese de indução,

$$\left\| y_i^{\bar{\ell}+j} - y_0^{\bar{\ell}+j} \right\| \leq j\rho_{(\bar{\ell}+j)} = j\rho_k. \quad (3.18)$$

Para $j = 1$ como na $\bar{\ell}$ -ésima iteração realizou-se um passo alternativo de sucesso a igualdade (3.2) é válida, onde $t = i$. Portanto, no início da iteração $(\bar{\ell} + 1)$ tem-se

$$\left\| y_i^{\bar{\ell}+1} - y_0^{\bar{\ell}+1} \right\| = \rho_{\bar{\ell}+1} = \rho_k.$$

Suponha que para algum $j \in \{1, \dots, k - \bar{\ell} - 1\}$ a hipótese (3.18) é satisfeita. Assim, com o auxílio de (3.4) e a hipótese acima, conclui-se que no início da próxima iteração a expressão a seguir é válida,

$$\left\| y_i^{\bar{\ell}+j+1} - y_0^{\bar{\ell}+j+1} \right\| \leq \left\| y_i^{\bar{\ell}+j} - y_0^{\bar{\ell}+j} \right\| + \rho_{\bar{\ell}+j} \leq j\rho_k + \rho_k = (j + 1)\rho_k.$$

Assim, a suposição (3.17) é verdadeira.

Com essa desigualdade e (3.16) tem-se que no início da k -ésima iteração

$$\|y_i - y_0\| \leq (k - \bar{\ell})\rho \leq (3n + 2)\rho,$$

o que conclui a prova. □

O próximo lema apresenta uma limitação entre os pontos interpoladores ao longo de uma iteração que altera o raio. Ressalta-se alguns resultados já mencionados devido a sua importância na demonstração.

- O conjunto de índices \mathcal{B} é preenchido ($\mathcal{B} = \{1, 2, \dots, n\}$), conforme R13, depois de cada iteração de região de confiança bem sucedida, conforme Condição 2.2, ou depois de cada redução no raio da região de confiança.
- Uma tentativa *beta* não é aceita sempre que esta não altera os pontos de interpolação, o qual ocorre quando $\mathcal{B} = \emptyset$ ou quando $\|y_i - y_0\| \leq \beta\rho$, para $i \in \mathcal{B}$ e $\beta > 1$.
- A Condição 2.9 nos diz que ρ diminui se uma tentativa de região de confiança é mal sucedida e se antes da próxima tentativa de região de confiança uma tentativa *beta* não alterou os pontos de interpolação.

Lema 3.5 [17, (4.4)] *Considere $\beta > 1$ o parâmetro definido na Seção 2.1.4. Se na k -ésima iteração o raio ρ da região de confiança diminui, então para todo $i = 1, 2, \dots, n$,*

$$\|y_i - y_0\| \leq 10 \max \{ (3n + 2); \beta \} \rho. \quad (3.19)$$

Demonstração.

Considere k o índice de uma iteração em que o raio da região de confiança é alterado. De acordo com o último comentário acima, conclui-se que na k -ésima iteração realiza-se uma tentativa *beta*. Considere o conjunto \mathcal{B} no início da iteração k e $\hat{\rho}$ o raio no início da iteração k . Fixado um índice $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, segue-se com a demonstração dividindo-a em dois casos.

Primeiramente suponha que $i \in \mathcal{B}$. Neste caso, tem-se imediatamente que o conjunto \mathcal{B} não é vazio. Como o raio é alterado no decorrer da iteração k sabe-se que a última tentativa de região de confiança anterior a k inclusive foi mal sucedida e que a tentativa *beta* realizada na iteração k é de insucesso. Como $\mathcal{B} \neq \emptyset$ tem-se que a condição (2.21) não é satisfeita, ou seja, para $i \in \mathcal{B}$ vale

$$\|y_i - y_0\| \leq \beta \hat{\rho}. \quad (3.20)$$

Para o segundo caso, em que $i \notin \mathcal{B}$, tem-se pelo Lema 3.4 a desigualdade (3.14).

Deste modo, com os resultados (3.14) e (3.20) obtidos nos casos acima, obtém-se que para $i \in \{1, 2, \dots, n\}$,

$$\|y_i - y_0\| \leq \max\{(3n + 2); \beta\} \hat{\rho}.$$

Como $\hat{\rho} = 10\rho$, onde na iteração k altera-se o raio para ρ , então (3.19) é obtido e a prova está concluída. \square

Para não carregar a notação é utilizada uma variável auxiliar para os resultados seguintes. Dada uma iteração k , denote por Γ_k a soma das distâncias de cada ponto interpolador do conjunto P^k , definido em (2.2), ao centro da região y_0 . Mais formalmente,

$$\Gamma_k = \sum_{i=1}^n \|y_i - y_0\|. \quad (3.21)$$

Note que, se ρ é o raio da região de confiança considerado na k -ésima iteração, então

$$\Gamma_{k+1} \leq \Gamma_k + n\rho, \quad (3.22)$$

uma vez que por (3.1) tem-se $\Gamma_{k+1} = \sum_{i=1}^n \|y_i^+ - y_0^+\| \leq \sum_{i=1}^n (\|y_i - y_0\| + \rho) = \Gamma_k + n\rho$.

O resultado seguinte estabelece uma relação entre a soma das distâncias das iterações que ocorrem entre duas tentativas *beta* particulares de mesmo raio. Além disso, obtém-se que sobre as mesmas condições, as tentativas do tipo *beta* realizadas são de sucesso.

Lema 3.6 [17, (4.8)] *Considere b e r duas tentativas alternativas beta consecutivas que utilizam o mesmo raio ρ e a constante $C_1 > 0$ definida por*

$$C_1 = \max\{(3n + 2); \beta; (2\tau_\beta + 2)n\} n,$$

onde $\tau_\beta \in \mathbb{N}$ é o parâmetro definido na Seção 2.1.4. Se

$$\Gamma_b > C_1 \rho, \quad (3.23)$$

então para $k = b + 1, b + 2, \dots, r$, tem-se

$$\Gamma_k < \Gamma_b, \quad (3.24)$$

onde Γ_k está descrito em (3.21).

Demonstração.

Considere b e r índices de duas iterações que realizam tentativas *beta* consecutivas com $b < r$, $\rho^b = \rho^r$ e a desigualdade (3.23) satisfeita. Como os raios das regiões de confiança do Algoritmo 2.1 não aumentam, todas as iterações de b a r utilizam o mesmo tamanho da região. Desta forma, omitem-se os índices dos raios das iterações de b a r , representando-os apenas por ρ .

Pela definição de Γ_b , tem-se

$$\Gamma_b = \sum_{i=1}^n \|y_i - y_0\| \leq \sum_{i=1}^n \max_{1 \leq j \leq n} \|y_j - y_0\| = n \|y_m - y_0\|,$$

onde $\|y_m - y_0\| = \max_{1 \leq j \leq n} \|y_j - y_0\|$, com $y_j \in P^b$ para $j = 1, 2, \dots, n$. Ao juntar este resultado com a hipótese (3.23) obtém-se as desigualdades

$$\|y_m - y_0\| \geq \frac{\Gamma_b}{n} > \max \{ (3n + 2); \beta; (2\tau_\beta) n \} \rho. \quad (3.25)$$

Consequentemente,

$$\|y_m - y_0\| > (3n + 2)\rho.$$

Assim, pelo Lema 3.4 tem-se que $m \in \mathcal{B}$. Logo, $\|y_m - y_0\|$ é também a maior das distâncias $\|y_j - y_0\|$, para $j \in \mathcal{B}$. Além disso, por (3.25) sabe-se que

$$\|y_m - y_0\| > \beta\rho.$$

Com isso,

$$\|y_m - y_0\| = \max_{1 \leq j \leq n} \|y_j - y_0\| = \max_{j \in \mathcal{B}} \|y_j - y_0\| > \beta\rho.$$

Portanto, as condições de (2.21) necessárias para que uma tentativa alternativa com escolha *beta* seja aceita são atingidas, onde $t = m$. Desta forma, se (3.23) é satisfeita, tem-se que a tentativa *beta* realizada na iteração b é de sucesso, $\|y_t^+ - y_0^+\| = \rho$ e consequentemente

$$\Gamma_{b+1} = \sum_{i=1}^n \|y_i^+ - y_0^+\| = \sum_{i=1, i \neq t}^n \|y_i^+ - y_0^+\| + \rho.$$

Usando isto e o Lema 3.1, tem-se que

$$\Gamma_{b+1} = \sum_{i=1, i \neq t}^n \|y_i^+ - y_0^+\| + \rho \leq \sum_{i=1, i \neq t}^n \|y_i - y_0\| + n\rho = \Gamma_b - \|y_t - y_0\| + n\rho.$$

Por outro lado, por (3.25) obtém-se que $-\|y_t - y_0\| \leq -\Gamma_b/n$. Consequentemente, com o resultado anterior tem-se a seguinte desigualdade

$$\Gamma_{b+1} \leq \Gamma_b - \|y_t - y_0\| + n\rho \leq \Gamma_b - \frac{\Gamma_b}{n} + n\rho. \quad (3.26)$$

Além disso, (3.23) fornece

$$-\frac{\Gamma_b}{n} < \min \{ -(3n + 2); -\beta; -(2\tau_\beta + 2)n \} \rho \leq -(2\tau_\beta + 2)n\rho. \quad (3.27)$$

Com os resultados em (3.26) e (3.27) conclui-se que

$$\Gamma_{b+1} \leq \Gamma_b - \frac{\Gamma_b}{n} + n\rho < \Gamma_b - (2\tau_\beta + 2)n\rho + n\rho = \Gamma_b - (2\tau_\beta + 1)n\rho. \quad (3.28)$$

Como o índice r representa a próxima iteração depois de b que realiza uma tentativa do tipo *beta*, tem-se pelo Lema 2.10 que entre as duas tentativas b e r do tipo *beta*, o máximo possível de iterações é $2\tau_\beta + 1$. Assim, $r - (b + 1) \leq 2\tau_\beta + 1$, uma vez que a tentativa *beta* realizada na iteração b foi computada. Desta maneira, para qualquer índice k , com $b < k \leq r$ tem-se

$$k - (b + 1) \leq 2\tau_\beta + 1. \quad (3.29)$$

Por outro lado, pela desigualdade (3.22), obtém-se $\Gamma_k \leq \Gamma_{k-1} + n\rho$ para $b < k \leq r$. Utilizando novamente a mesma desigualdade para Γ_{k-1} , tem-se que $\Gamma_k \leq \Gamma_{k-2} + 2n\rho$. Consequentemente, utilizando esta desigualdade recursivamente até $b + 1$, obtém-se $\Gamma_k \leq \Gamma_{b+1} + [k - (b + 1)]n\rho$ e por (3.29) tem-se

$$\Gamma_k \leq \Gamma_{b+1} + [2\tau_\beta + 1]n\rho,$$

para $k \in \{b + 1, b + 2, \dots, r\}$.

Finalmente, por (3.28) obtém-se

$$\Gamma_k \leq \Gamma_{b+1} + [2\tau_\beta + 1]n\rho \leq \Gamma_b - [2\tau_\beta + 1]n\rho + [2\tau_\beta + 1]n\rho = \Gamma_b$$

para $b < k \leq r$ e a prova está concluída. □

O próximo resultado complementa o anterior, analisando o caso em que a condição (3.23) não vale.

Lema 3.7 [17, (4.9)] *Considere b e r , com $b < r$, índices de duas tentativas beta consecutivas com mesmo raio. Seja $C_1 > 0$ a constante definida no lema anterior. Se (3.23) não é satisfeita, então para $b < k \leq r$, tem-se*

$$\Gamma_k \leq [C_1 + (2\tau_\beta + 2)n]\rho. \quad (3.30)$$

Demonstração.

Sejam b e r , com $b < r$, índices de duas tentativas do tipo *beta* consecutivas que satisfaçam as hipóteses.

Como a desigualdade (3.23) falha, tem-se $\Gamma_b \leq C_1\rho$. Além disso, a desigualdade (3.22) é válida para qualquer $k \in \{b, b + 1, \dots, r - 1\}$. Assim, para $i = 1, 2, \dots, r - b$ prova-se a seguir que

$$\Gamma_{b+i} \leq (C_1 + in)\rho. \quad (3.31)$$

De fato, tem-se por indução que a afirmação acima é verdadeira, uma vez que, para $i = 1$ com (3.22) e (3.23) tem-se que

$$\Gamma_{b+1} \leq \Gamma_b + n\rho \leq C_1\rho + n\rho,$$

logo o resultado é válido. Agora, suponha que para um índice i qualquer, com $1 < i < r - b$, a afirmação seja verdadeira. Assim, por (3.22) e a hipótese de indução,

$$\Gamma_{b+i+1} \leq \Gamma_{b+i} + n\rho \leq [C_1 + (i - 1)n]\rho + n\rho = (C_1 + in)\rho$$

e a afirmação é provada.

Por outro lado, pelo Lema 2.10 tem-se que $r - b \leq 2\tau_\beta + 2$. Assim, como $i \leq r - b$ e como (3.31) vale, tem-se

$$\Gamma_{b+i} \leq (C_1 + in)\rho \leq [C_1 + (r - b)n]\rho \leq [C_1 + (2\tau_\beta + 2)n]\rho,$$

para $i = 1, 2, \dots, r - b$, concluindo a demonstração. \square

Os dois resultados anteriores estabelecem limitações para a soma das distâncias de cada ponto interpolador ao centro y_0 para todas as iterações que ocorrem entre duas tentativas *beta* de mesmo raio. O lema seguinte estabelece uma limitação desde a primeira iteração que emprega um determinado raio até a primeira iteração que realiza uma tentativa *beta* com este mesmo raio. Neste resultado, utilizam-se os índices dos pontos interpoladores para melhor esclarecimento.

Lema 3.8 [17, (4.10)] *Considere ν o índice da iteração em que o raio da região de confiança foi diminuído para ρ e ω o índice da primeira iteração que realiza uma tentativa alternativa *beta* com o raio ρ . Então existe uma constante $C_2 > 0$ tal que, para $k = \nu, \nu + 1, \dots, \omega$,*

$$\Gamma_k \leq \{C_2 + (2\tau_\beta + 2)n\}\rho. \quad (3.32)$$

Demonstração.

Como o raio foi alterado na ν -ésima iteração, pelo Lema 3.5, sabe-se que para $i = 1, 2, \dots, n$,

$$\|y_i^\nu - y_0^\nu\| \leq 10 \max\{(3n + 2); \beta\}\rho.$$

Deste modo,

$$\Gamma_\nu = \sum_{i=1}^n \|y_i^\nu - y_0^\nu\| \leq \sum_{i=1}^n 10 \max\{(3n + 2); \beta\}\rho = 10 \max\{(3n + 2); \beta\}n\rho. \quad (3.33)$$

Tome

$$C_2 = 10 \max\{(3n + 2); \beta\}n. \quad (3.34)$$

Assim, a condição (3.32) é válida para $k = \nu$.

Para as iterações de $\nu + 1$ a ω , demonstra-se a seguir que como os raios adotados nessas iterações são iguais a ρ , tem-se por (3.22), para $i = 1, 2, \dots, \omega - \nu$, que

$$\Gamma_{\nu+i} \leq (C_2 + in)\rho.$$

De fato, para $i = 1$, por (3.22) e (3.33) tem-se que

$$\Gamma_{\nu+1} \leq \Gamma_\nu + n\rho \leq C_2\rho + n\rho.$$

Considere a seguinte hipótese de indução,

$$\Gamma_{\nu+i} \leq (C_2 + in)\rho,$$

onde $1 < i < \omega - \nu$. Assim, por (3.22) e a hipótese acima, tem-se

$$\Gamma_{\nu+i+1} \leq \Gamma_{\nu+i} + n\rho \leq (C_2 + in)\rho + n\rho = [C_2 + (i + 1)n]\rho.$$

Por outro lado, como o raio foi alterado na iteração ν , tem-se que nessa realiza-se uma tentativa alternativa *beta*. Desta maneira, pelo Lema 2.10 tem-se $i \leq \omega - \nu \leq 2\tau_\beta + 2$. Assim,

$$\Gamma_{\nu+i} \leq (C_2 + in)\rho \leq [C_2 + (2\tau_\beta + 2)n]\rho$$

com $0 < i \leq \omega - \nu$ e a demonstração está concluída. □

Estabelece-se na próxima análise que todos os pontos interpoladores gerados ao longo de cada iteração com um determinado raio estão sempre delimitados por uma região que depende deste raio.

Lema 3.9 [17, Lema 2] *Existe uma constante $C_3 > 1$ tal que, em toda iteração k os pontos de interpolação $y_i \in P^k$, para $i = 0, 1, \dots, n$, satisfazem*

$$\|y_i - y_0\| \leq C_3\rho.$$

Demonstração.

Considere k o índice de uma iteração qualquer que utiliza ρ o raio para a região de confiança, ν o índice da iteração que alterou o raio para ρ e ω o índice da primeira iteração que realiza uma tentativa *beta* com o raio ρ . De acordo com o resultado R8 sabe-se que a última tentativa realizada com o raio ρ é do tipo *beta*. Assim, qualquer iteração que considera este raio está ou entre ν e ω ou entre duas iterações que realizam tentativas *beta* consecutivas, uma vez que ω é a primeira iteração que realiza uma tentativa *beta* com o raio ρ . Deste modo, a demonstração é analisada para os dois casos em que k está entre ν e ω ou entre duas tentativas *beta* consecutivas.

Caso 1. $\nu \leq k \leq \omega$:

Pelo Lema 3.8, existe uma constante C_2 tal que

$$\|y_i - y_0\| \leq \Gamma_k \leq \{C_2 + (2\tau_\beta + 2)n\}\rho,$$

para $i = 0, 1, \dots, n$.

Caso 2. $k > \omega$:

Como a iteração ω realiza uma tentativa *beta* e a última tentativa com o raio ρ é do tipo *beta*, conclui-se que k está entre duas iterações que realizam tentativas do tipo *beta* consecutivas. Assim, considere b e r os índices das iterações que realizam tentativas *beta* consecutivas com $b \leq k \leq r$. Como procura-se uma cota superior para Γ_k que seja válida para toda iteração k que utiliza o raio ρ , considere sem perda de generalidade que Γ_k é o maior dos números Γ_i , para $i = b, b+1, \dots, k$. Essa suposição exclui automaticamente a possibilidade (3.24). Deste modo, pela contrapositiva do Lema 3.6 tem-se que (3.23) falha, o que implica pelo Lema 3.7 que (3.30) é satisfeita em k .

Deste modo, os dois casos garantem que para $y_i \in P^k$ com $i = 0, 1, \dots, n$

$$\|y_i - y_0\| \leq \Gamma_k \leq C_3\rho,$$

com

$$C_3 = \max \{ C_1; C_2 \} + (2\tau_\beta + 2)n. \quad (3.35)$$

Note que $C_3 > 1$. De fato, por (3.23), (3.34) e (3.35), tem-se

$$C_3 = \max \{ \max \{ (3n+2); \beta; (2\tau_\beta+2)n \} n; \max \{ (3n+2); \beta \} n \} + (2\tau_\beta+2)n.$$

Desta forma,

$$C_3 = \max \{ (3n+2); \beta; (2\tau_\beta+2)n \} n + (2\tau_\beta+2)n \geq (2\tau_\beta+2)(n+n^2) > 1,$$

pois τ_β e n são naturais.

□

As iterações que ocorrem entre duas tentativas *alpha* consecutivas também possuem uma propriedade importante discutida no próximo lema. Antes de enunciá-lo convém fazer algumas observações. Como a primeira tentativa realizada com um raio novo é obrigatoriamente do tipo *alpha*, conclui-se que as iterações realizadas entre duas tentativas *alpha* consecutivas consideram o mesmo raio e obviamente, essas são necessariamente do tipo *beta* ou região de confiança.

Lema 3.10 [17, (5.6)] *Seja $C_3 > 1$ a constante dada no lema anterior. Considere ℓ e m índices de duas iterações consecutivas que realizam tentativas *alpha*. Deste modo, para $k = \ell + 1, \ell + 2, \dots, m - 1$, tem-se*

$$|\det D^{k+1}| \geq \frac{|\det D^k|}{2nC_3}, \quad (3.36)$$

onde D^k é a matriz descrita em (3.6).

Demonstração.

Considere ℓ e m índices de duas iterações consecutivas que realizam tentativas *alpha* e ρ o raio da região de confiança ao longo das iterações de índices de ℓ a $m - 1$. Fixado um índice $k \in \{\ell + 1, \ell + 2, \dots, m - 1\}$ são considerados dois casos.

Caso 1. A k -ésima iteração é do tipo região de confiança.

Neste caso o passo d^k , obtido nesta iteração, pode satisfazer ou não a Condição 2.2. Se o passo não satisfizer (2.13), então o número da iteração é incrementada, mas $P^{k+1} = P^k$ e consequentemente $D^k = D^{k+1}$. Assim, como $C_3 > 1$ tem-se a desigualdade (3.36) como desejado.

Por outro lado, se o passo d^k for bem sucedido, então os valores de θ_i são calculados, para $i = 0, 1, \dots, n$, e consequentemente d^k é solução de (2.16). Como $x^k = y_0$, para $y_0 \in P^k$, obtém-se

$$d^k = \sum_{i=1}^n \theta_i (y_i - y_0),$$

onde $y_i \in P^k$, para $i = 1, 2, \dots, n$. Assim, pela desigualdade triangular e por (2.17),

tem-se $\|d^k\| \leq \sum_{i=1}^n |\theta_i| \|y_i - y_0\| \leq \sum_{i=1}^n |\theta_i| \|y_i - y_0\|$. Além disso, o Lema 3.9 garante que

existe uma constante $C_3 > 1$ tal que $\|y_i - y_0\| \leq C_3\rho$, para $y_i \in P^k$ e $i \in \{0, 1, \dots, n\}$. Deste modo, $\|d^k\| \leq n |\theta_t| C_3\rho$, ou ainda de uma outra maneira

$$|\theta_t| \geq \frac{\|d^k\|}{nC_3\rho}.$$

Combinando (3.9) com a desigualdade acima, tem-se

$$|\det D^{k+1}| = |\theta_t| |\det D^k| \geq \frac{\|d^k\|}{nC_3\rho} |\det D^k|.$$

Além disso, como o passo de região de confiança só é contabilizado se as condições (2.12) são satisfeitas, então tem-se $\|d^k\| \geq \frac{\rho}{2}$. Portanto,

$$|\det D^{k+1}| \geq \frac{1}{2nC_3} |\det D^k|$$

provando o resultado para qualquer iteração k entre ℓ e m do tipo região de confiança.

Caso 2. A k -ésima iteração é do tipo *beta*.

Considere $t \in \{1, 2, \dots, n\}$ o índice que satisfaz a Condição 2.8 e por $\sigma_t = \min \{\|y_t - x\| : x \in \mathcal{H}_t\}$ a distância de $y_t \in P^k$ ao hiperplano \mathcal{H}_t que contém os pontos $y_i \in P^k$, para $i \in \{0, 1, \dots, n\} \setminus \{t\}$. Como $y_0 \in \mathcal{H}_t$, tem-se $\sigma_t \leq \|y_t - y_0\|$. Deste modo, pelo Lema 3.9, tem-se $\sigma_t \leq C_3\rho$ e consequentemente

$$\frac{\rho}{\sigma_t} \geq \frac{1}{C_3}. \quad (3.37)$$

Por outro lado, pelo Lema 1.11, tem-se que

$$\frac{|\det D^{k+1}|}{|\det D^k|} = \frac{\sigma_t^+}{\sigma_t},$$

onde y_t foi substituído por $x^k + d^k$ na matriz D^{k+1} e $\sigma_t^+ = \min \{\|x^k + d^k - x\| : x \in \mathcal{H}_t\}$. Note que como um passo alternativo foi tomado, a distância σ_t^+ é exatamente ρ . Assim, por (3.37) tem-se

$$\frac{|\det D^{k+1}|}{|\det D^k|} = \frac{\rho}{\sigma_t} \geq \frac{1}{C_3} \geq \frac{1}{2nC_3},$$

completando a demonstração. □

Os Lemas 3.9 e 3.10 são fundamentais para a prova de convergência do algoritmo. Eles garantem que os pontos interpoladores embora estejam cada vez mais próximos entre si, à medida que o raio diminui, eles permanecem afim-independentes.

Corolário 3.11 *Considere as iterações ℓ e m assim como no lema anterior. Então para qualquer iteração k entre ℓ e m e para $i = 1, 2, \dots, m - k$, tem-se*

$$|\det D^{k+i}| \geq \frac{|\det D^k|}{(2nC_3)^i}.$$

Demonstração.

Segue trivialmente do lema anterior por recorrência. □

Corolário 3.12 *Se a iteração ℓ realiza uma tentativa α de insucesso, então (3.36) é válida para $k = \ell$.*

Demonstração.

Como na iteração ℓ uma tentativa α de insucesso é realizada, esta é do tipo β ou região de confiança. A prova é análoga à do Lema 3.10 com $k = \ell$. \square

Para o próximo lema recorde do Capítulo 2 o resultado R11, que se τ_α tentativas de região de confiança são realizadas com o mesmo raio desde a última tentativa α , então uma tentativa α deve ser realizada antes da próxima tentativa de região de confiança. Além disso, com o Lema 2.11 tem-se que a cada sequência de $3n + 3$ iterações sem uma redução no raio da região de confiança, pelo menos uma dessas iterações é uma iteração de região de confiança de sucesso. Assim, considera-se para o resultado seguinte o parâmetro $\hat{\tau}_\alpha$ de modo que, sempre que executadas $\hat{\tau}_\alpha$ iterações consecutivas com o mesmo raio, essas incluem pelo menos uma tentativa alternativa α .

Lema 3.13 [17, (5.7)] *Considere o parâmetro $\alpha \in (0, 1)$ dado no Algoritmo 2.1, $C_3 > 1$ a constante dada no Lema 3.9, $\hat{\tau}_\alpha$ como mencionado acima e $\ell < m$ índices de duas iterações consecutivas que realizam tentativas α . Seja ρ o raio considerado ao longo das iterações de ℓ a $m - 1$ e a constante $C_4 > 0$ definida por*

$$C_4 = \left[\min \left\{ \alpha; (2nC_3)^{-\hat{\tau}_\alpha} \right\} \right]^n. \quad (3.38)$$

Se

$$|\det D^\ell| < C_4 \rho^n, \quad (3.39)$$

então, a iteração ℓ é do tipo α e para todo $k = \ell, \ell + 1, \dots, m - 1$, tem-se

$$|\det D^{k+1}| > |\det D^\ell|. \quad (3.40)$$

Demonstração.

Por hipótese, na ℓ -ésima iteração é realizada uma tentativa α . Na sequência, mostra-se que esta tentativa é de sucesso. Pelo Lema 3.3, (3.38) e (3.39) tem-se que

$$\prod_{i=1}^n \sigma_i \leq |\det D^\ell| < C_4 \rho^n \leq (\alpha \rho)^n.$$

Além disso, como $\sigma_t \leq \sigma_i$, para $i = 1, 2, \dots, n$, tem-se

$$\sigma_t^n \leq \prod_{i=1}^n \sigma_i \leq |\det D^\ell| < (\alpha \rho)^n. \quad (3.41)$$

Portanto, $\sigma_t < \alpha \rho$ que pela Condição 2.7 implica que ℓ é do tipo α de sucesso.

Note que da desigualdade (3.41), $\sigma_t \leq |\det D^\ell|^{\frac{1}{n}}$. Assim, como a tentativa α realizada na iteração ℓ é de sucesso, um novo conjunto interpolador é formado para

a próxima iteração. Pelo Lema 1.11, o fato que $\sigma_t^+ = \rho$ e o resultado anterior, obtém-se que

$$\frac{|\det D^{\ell+1}|}{|\det D^\ell|} = \frac{\sigma_t^+}{\sigma_t} \geq \frac{\rho}{|\det D^\ell|^{\frac{1}{n}}},$$

ou analogamente,

$$|\det D^{\ell+1}| \geq \rho \frac{|\det D^\ell|}{|\det D^\ell|^{\frac{1}{n}}}.$$

Usando isto, (3.38), (3.39) e o fato que $C_3 > 1$, tem-se

$$|\det D^{\ell+1}| > |\det D^\ell| (2nC_3)^{\widehat{\tau}_\alpha} > |\det D^\ell|, \quad (3.42)$$

o que prova (3.40) para $k = \ell$.

Considere agora k uma iteração qualquer com $k \in \{\ell + 1, \ell + 2, \dots, m - 1\}$. Sabe-se que essas iterações são do tipo região de confiança ou do tipo *beta*. Além disso, para $i = 1, 2, \dots, m - k$, pelo Corolário 3.11 tem-se

$$|\det D^{k+i}| \geq \frac{|\det D^k|}{(2nC_3)^i}.$$

Reescrevendo a desigualdade acima com $k = \ell + 1$, tem-se para $i = 2, 3, \dots, m - (\ell + 1)$

$$|\det D^{\ell+1+i}| \geq \frac{|\det D^{\ell+1}|}{(2nC_3)^i}.$$

Usando isto e (3.42), tem-se

$$|\det D^{\ell+1+i}| > |\det D^\ell| (2nC_3)^{\widehat{\tau}_\alpha - i} \geq |\det D^\ell|,$$

uma vez que, $i \leq m - (\ell + 1) \leq \widehat{\tau}_\alpha$ e $C_3 > 1$. Aplicando o raciocínio recursivamente para $k = \ell + 2, \dots, m - 1$, tem-se o resultado. \square

O lema seguinte estabelece uma relação no caso alternativo ao lema anterior, em que a condição (3.39) não é satisfeita.

Lema 3.14 [17, (5.10)] *Considere $\alpha \in (0, 1)$ o parâmetro dado no Algoritmo 2.1, $C_3 > 1$ e $C_4 > 0$ as constantes dadas nos Lemas 3.9 e 3.13, respectivamente, e $\ell < m$ índices de duas iterações consecutivas que realizam tentativas *alpha*. Seja ρ o raio considerado ao longo das iterações de ℓ a $m - 1$. Se (3.39) não vale então, para $k = \ell, \ell + 1, \dots, m - 1$, tem-se*

$$|\det D^{k+1}| \geq \frac{C_4 \rho^n}{(2nC_3)^{\widehat{\tau}_\alpha}}. \quad (3.43)$$

Demonstração.

Como a desigualdade (3.39) não é satisfeita, tem-se

$$|\det D^\ell| \geq C_4 \rho^n. \quad (3.44)$$

Prova-se inicialmente que a iteração de índice ℓ , do tipo *alpha*, *beta* ou região de confiança, satisfaz (3.43) para $k = \ell$. De fato, se a iteração é do tipo *alpha*, tem-se um aumento no volume da envoltória convexa e assim,

$$|\det D^{\ell+1}| > |\det D^\ell|. \quad (3.45)$$

Por outro lado, se a tentativa *alpha* é de insucesso, então o Corolário 3.12 garante que

$$|\det D^{\ell+1}| \geq \frac{|\det D^\ell|}{2nC_3}. \quad (3.46)$$

Em ambos os casos, por (3.44) e o fato de que $(2nC_3) > 1$ e $\hat{\tau}_\alpha > 1$, tem-se (3.43) para $k = \ell$.

Considere agora as iterações de índices $k \in \{\ell + 1, \ell + 2, \dots, m - 1\}$. Como essas iterações são do tipo *beta* ou região de confiança, pelo Corolário 3.11, para qualquer \hat{k} entre ℓ e m e $i = 1, 2, \dots, m - \hat{k}$, tem-se

$$|\det D^{\hat{k}+i}| \geq \frac{|\det D^{\hat{k}}|}{(2nC_3)^i}.$$

Inicialmente tomando $\hat{k} = \ell + 1$ e depois $k = \ell + i$, tem-se

$$|\det D^{k+1}| \geq \frac{|\det D^{\ell+1}|}{(2nC_3)^{k-\ell}}.$$

Como $k - \ell + 1 \leq \hat{\tau}_\alpha$ e $(2nC_3) > 1$, tem-se $(2nC_3)^{k-\ell} \leq (2nC_3)^{\hat{\tau}_\alpha-1}$. Deste modo, obtém-se

$$|\det D^{k+1}| \geq \frac{|\det D^{\ell+1}|}{(2nC_3)^{\hat{\tau}_\alpha-1}}.$$

Sabe-se que se a iteração ℓ é do tipo *alpha*, (3.45) é válida. Por outro lado, se a iteração ℓ é do tipo região de confiança ou *beta*, então vale (3.46). Em ambos os casos, usando (3.44) e o fato que $(2nC_3) > 1$ e $\hat{\tau}_\alpha > 1$, tem-se o resultado para $k \in \{\ell + 1, \ell + 2, \dots, m - 1\}$ e o lema está demonstrado. □

Corolário 3.15 [17, (5.11)] *Considere ℓ e m os índices de duas iterações consecutivas que realizam tentativas *alpha* e as constantes $C_3 > 1$ e $C_4 > 0$ dadas nos Lemas 3.9 e 3.13, respectivamente. Então, para $\ell \leq k < m$, tem-se*

$$|\det D^{k+1}| \geq \min \left\{ |\det D^\ell|; \frac{C_4 \rho^n}{(2nC_3)^{\hat{\tau}_\alpha}} \right\}. \quad (3.47)$$

Demonstração.

Consequência dos Lemas 3.13 e 3.14. □

A desigualdade (3.47) vale para qualquer iteração entre duas iterações consecutivas que realizam uma tentativa *alpha*. O próximo lema generaliza o resultado para

iterações que consideram o mesmo raio. Para tal, são analisados alguns casos anteriormente. Considere um raio ρ e seja ν o índice da primeira iteração que utilizou o raio ρ . Suponha que ao longo de algumas iterações esse raio sofra uma alteração e ν^+ represente o índice da primeira iteração com o novo raio. Recorde da Seção 2.4, que a cada mudança no raio a primeira tentativa deve ser do tipo *alpha*. Deste modo, as iterações ν e ν^+ são iterações que realizam tentativas *alpha*. Além disso, considere $\widehat{\ell}$ o índice da iteração consecutiva à ν que realiza uma tentativa *alpha*. Logo para $k \in \{\nu, \nu + 1, \dots, \widehat{\ell} - 1\}$, (3.47) é válida com $\ell = \nu$. Assim, basta fazer a análise para uma iteração qualquer de índice k entre $\widehat{\ell}$ e ν^+ . Este raciocínio está representado na Figura 3.1.

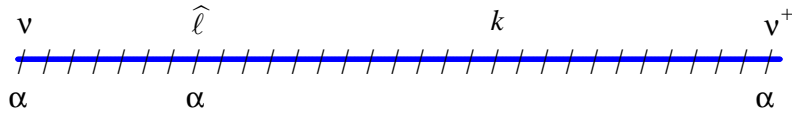


Figura 3.1: Sequência de iterações que utilizam o mesmo raio da região de confiança.

Lema 3.16 [17, (5.12)] *Considere ν a iteração que alterou o raio para ρ e as constantes $C_3 > 1$ e $C_4 > 0$ dadas nos Lemas 3.9 e 3.13, respectivamente. Então, para toda iteração de índice $k \geq \nu$ que considera o mesmo raio que a iteração ν , tem-se*

$$|\det D^{k+1}| \geq \min \left\{ |\det D^\nu|; \frac{C_4 \rho^n}{(2nC_3)^{\widehat{\tau}_\alpha}} \right\}. \quad (3.48)$$

Demonstração.

Considere ν^+ o índice da primeira iteração que considera o raio 0.1ρ e $\widehat{\ell}$ o índice da iteração que realiza uma tentativa *alpha* consecutiva a ν . Se $\widehat{\ell} = \nu^+$ o resultado está demonstrado pelo corolário anterior. Caso contrário, conforme discutido no parágrafo anterior ao lema, tem-se que (3.48) vale para $k = \nu, \nu + 1, \dots, \widehat{\ell} - 1$. Deste modo, basta provar para as iterações de índices entre $\widehat{\ell}$ e ν^+ .

Suponha por contradição que (3.48) seja falsa. Logo existe um índice k com $\widehat{\ell} \leq k < \nu^+$ tal que

$$|\det D^{k+1}| < \min \left\{ |\det D^\nu|; \frac{C_4 \rho^n}{(2nC_3)^{\widehat{\tau}_\alpha}} \right\}. \quad (3.49)$$

Considere, sem perda de generalidade, k o menor índice tal que (3.48) falhe, assim a desigualdade (3.48) é válida para todas as iterações de ν a $k - 1$. Com isso e (3.49), para $i = \nu, \nu + 1, \dots, k - 1$, tem-se

$$|\det D^{i+1}| \geq \min \left\{ |\det D^\nu|; \frac{C_4 \rho^n}{(2nC_3)^{\widehat{\tau}_\alpha}} \right\} > |\det D^{k+1}|. \quad (3.50)$$

Considere ℓ e m , com $\ell \leq k < m$, os primeiros índices antes e depois de k , respectivamente, de iterações que fizeram tentativas consecutivas do tipo *alpha*. Esta sequência é ilustrada na Figura 3.2. Pelo Corolário 3.15, (3.47) é válida nos índices k , para $\widehat{\ell} \leq \ell \leq k < m$. Por (3.50), tem-se para $i = \ell - 1$ que $|\det D^{k+1}| < |\det D^\ell|$,

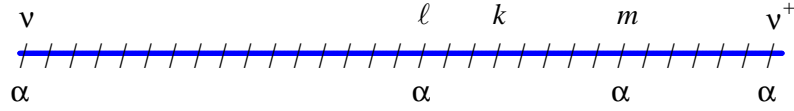


Figura 3.2: Sequência de iterações que consideram o mesmo raio.

o que juntamente com o Corolário 3.15 fornece $|\det D^{k+1}| \geq \frac{C_4 \rho^n}{(2nC_3)^{\hat{\tau}_\alpha}}$, contradizendo (3.49). Logo, (3.48) é válida para todo $k \in \{\nu, \nu+1, \dots, \nu^+-1\}$ e a demonstração está concluída. \square

O próximo resultado estabelece um limitante para o determinante da matriz de interpolação, onde este limite está em função apenas do raio da região de confiança.

Lema 3.17 [17, Lema 3] *Considere ρ_1 o raio inicial do Algoritmo 2.1, ρ o raio na k -ésima iteração, $C_4 > 0$ a constante dada no Lema 3.13, $\hat{\tau}_\alpha \in \mathbb{N}$ e defina a constante $C_5 > 0$ por*

$$C_5 = \min \left\{ \frac{|\det D^1|}{\rho_1^n}; \frac{C_4}{(2nC_3)^{\hat{\tau}_\alpha}} \right\}.$$

Então

$$|\det D^k| \geq C_5 \rho^n. \quad (3.51)$$

Demonstração.

Inicialmente, pela definição de C_5 , tem-se imediatamente que $|\det D^1| \geq C_5 \rho_1^n$. A prova do lema é feita por indução com base nas iterações em que o raio é alterado.

Considere $k = 1$. Pelas exigências do Algoritmo 2.1 a primeira tentativa é do tipo *alpha*. Pelo Lema 3.16, para toda iteração $j \geq 1$ que considera o raio $\rho = \rho_1$, tem-se

$$|\det D^{j+1}| \geq \min \left\{ |\det D^1|; \frac{C_4 \rho_1^n}{(2nC_3)^{\hat{\tau}_\alpha}} \right\} = C_5 \rho_1^n.$$

Suponha que (3.51) é satisfeita no início da primeira iteração ν que considera um determinado raio ρ . Considere ν^+ o índice da primeira iteração que utiliza o raio $\rho^+ = 0.1\rho$. Para todas as iterações de índices j com $\nu \leq j < \nu^+$ tem-se, pelo Lema 3.16, pela hipótese de indução e pela definição de C_5 que

$$\begin{aligned} |\det D^{j+1}| &\geq \min \left\{ |\det D^\nu|; \frac{C_4 \rho^n}{(2nC_3)^{\hat{\tau}_\alpha}} \right\} \\ &\geq \min \left\{ C_5; \frac{C_4}{(2nC_3)^{\hat{\tau}_\alpha}} \right\} \rho^n \\ &= C_5 \rho^n. \end{aligned}$$

Logo, basta provar que o resultado é válido no início da iteração ν^+ .

Sabe-se que para a iteração de índice $\nu^+ - 1$ vale

$$|\det D^{\nu^+}| \geq C_5 \rho^n > C_5 (\rho^+)^n, \quad (3.52)$$

uma vez que $\rho > \rho^+$. Além disso, para toda iteração $j \geq \nu^+$ que considera o raio ρ^+ , tem-se pelo Lema 3.16 e por (3.52) que

$$|\det D^{j+1}| \geq \min \left\{ C_5 (\rho^+)^n; \frac{C_4 (\rho^+)^n}{(2nC_3)^{\widehat{\tau}_\alpha}} \right\} = C_5 (\rho^+)^n,$$

concluindo a demonstração.

□

Capítulo 4

Convergência Global

Neste capítulo apresenta-se a convergência do Algoritmo 2.1. Para a demonstração é adotada a abordagem clássica, onde prova-se inicialmente que se a sequência gerada pelo algoritmo é infinita e se algumas condições sobre a função objetivo e o modelo são satisfeitas, então a sequência possui um ponto de acumulação estacionário. Em seguida, demonstra-se que sobre as mesmas exigências todo ponto de acumulação da sequência gerada pelo algoritmo é estacionário.

Para estabelecer a convergência suponha as seguintes hipóteses:

H1 A sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}} \subset \mathbb{R}^n$ gerada pelo Algoritmo 2.1 é infinita.

H2 As Hessianas dos modelos Q^k são uniformemente limitadas, isto é, existe uma constante $M > 0$ tal que $\|G^k\| = \|\nabla^2 Q^k(x)\| \leq M$, para todo $k \in \mathbb{N}$ e $x \in \mathbb{R}^n$.

H3 A função objetivo F é duas vezes diferenciável.

H4 A função F é limitada inferiormente.

H5 As Hessianas de F são uniformemente limitadas, ou seja, existe uma constante $N > 0$ tal que $\|\nabla^2 F(x)\| \leq N$, para todo $x \in \mathbb{R}^n$.

4.1 Convergência fraca

Esta seção estabelece que se as Hipóteses H1 - H5 são satisfeitas, então existe um ponto de acumulação da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ que é estacionário. Este resultado é demonstrado em duas partes. Primeiramente, estabelece-se uma limitação superior, dependendo do raio, para o gradiente da função F em pelo menos uma das iterações com cada raio, mais formalmente, em uma subsequência dos naturais. Posteriormente, mostra-se o término da sequência de iterações com cada raio ρ .

Observe que demonstradas as afirmações acima, como o raio não sofre acréscimo e H1 é satisfeita, a segunda parte da demonstração fornece que a sequência dos raios de região de confiança tende a zero. Desta maneira, a limitação do gradiente da função objetivo em uma subsequência dos naturais que depende dos raios e a convergência da sequência dos raios para zero, garantem que o gradiente da função objetivo na sequência gerada pelo Algoritmo 2.1 tende a zero em pelo menos uma subsequência dos naturais. Mais formalmente, existe pelo menos um ponto de acumulação da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ que é estacionário.

4.1.1 Gradiente de F limitado em uma subsequência

Esta parte garante que se as Hipóteses H2 - H5 são satisfeitas, então existe uma subsequência infinita de $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$, tal que a norma do gradiente da função objetivo nessa subsequência é limitada superiormente. Para tal, são obtidos alguns resultados auxiliares.

Considera-se para o primeiro lema as funções de Lagrange Λ_j das equações de interpolação (2.8), para $j = 0, 1, \dots, n$, de modo que, para $x \in \mathbb{R}^n$, a função $\Lambda_j(x)$ seja o polinômio linear que assume os seguintes valores,

$$\Lambda_j(y_i) = \delta_{ij}, \quad (4.1)$$

para $y_i \in P^k$ e $i = 0, 1, \dots, n$, onde δ_{ij} é o delta de Kronecker, definido por,

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}. \quad (4.2)$$

Note que os coeficientes de cada Λ_j são definidos unicamente devido às equações (4.2) e à não-singularidade da matriz D^k definida em (3.6). Observe também que, dada a k -ésima iteração as funções Λ_j , para $j = 0, 1, \dots, n$, variam de acordo com cada conjunto interpolador P^k , porém os índices das iterações são omitidos para não sobrecarregar a notação.

Lema 4.1 [17, (3.2)] *Considere para $j = 0, 1, \dots, n$ as funções de Lagrange Λ_j definidas em (4.1) e k o índice de uma iteração qualquer. Se $\|x - x^k\| \leq \rho$, onde ρ é o raio considerado na iteração k , então existe uma constante $C_6 > 0$, tal que*

$$\sum_{j=0}^n |\Lambda_j(x)| \leq C_6.$$

Demonstração.

Para cada $j = 0, 1, \dots, n$, considere $\Delta_j(x) \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}$ uma variante da matriz D^k , onde sua j -ésima coluna é substituída por x seguida de 1, ou seja, para $x \in \mathbb{R}^n$, tem-se

$$\Delta_j(x) = \begin{pmatrix} y_0 & y_1 & \cdots & y_{j-1} & x & y_{j+1} & \cdots & y_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Note que o determinante de $\Delta_j(x)$ é um polinômio linear com

$$\det \Delta_j(y_i) = \begin{cases} 0, & i \in \{0, 1, \dots, n\} \setminus \{j\} \\ \det D^k, & i = j \end{cases}. \quad (4.3)$$

Fixado $x \in \mathbb{R}^n$, considere o sistema linear na variável $z \in \mathbb{R}^n$, dado por

$$D^k z = \begin{pmatrix} x \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Pela regra de Cramer, tem-se

$$z_j(x) = \frac{\det \Delta_j(x)}{\det D^k}. \quad (4.4)$$

Por (4.1), (4.2) e (4.3), tem-se para $i = 0, 1, \dots, n$

$$z_j(y_i) = \delta_{ij} = \Lambda_j(y_i),$$

onde $y_i \in P^k$. Comparando esta expressão com (4.4), tem-se pela unicidade do polinômio de Lagrange que

$$\Lambda_j(x) = \frac{\det \Delta_j(x)}{\det \Delta_j(y_j)} = \frac{\det \Delta_j(x)}{\det D^k},$$

para $x \in \mathbb{R}^n$ e $j = 0, 1, \dots, n$. Assim, como o Lema 3.17 garante que existe uma constante $C_5 > 0$, tal que $|\det D^k| \geq C_5 \rho^n$, segue que

$$\sum_{j=1}^n |\Lambda_j(x)| = \sum_{j=1}^n \left| \frac{\det \Delta_j(x)}{\det D^k} \right| \leq \sum_{j=1}^n \frac{|\det \Delta_j(x)|}{C_5 \rho^n}. \quad (4.5)$$

Pelo mesmo argumento usado para provar o Lema 3.3, com x no lugar de y_j , obtém-se que, para $j = 0, 1, \dots, n$, vale

$$|\det \Delta_j(x)| \leq \|x - y_0\| \prod_{i=1, i \neq j}^n \|y_i - y_0\|.$$

Usando isto e o Lema 3.9, existe $C_3 > 1$ tal que

$$|\det \Delta_j(x)| \leq \rho \prod_{i=1, i \neq j}^n C_3 \rho = C_3^{n-1} \rho^n, \quad (4.6)$$

uma vez que, $x^k = y_0$ e por hipótese $\|x - x^k\| \leq \rho$.

Desta maneira, por (4.5) e (4.6) conclui-se que

$$\sum_{j=1}^n |\Lambda_j(x)| \leq \sum_{j=1}^n \frac{(C_3)^{n-1} \rho^n}{C_5 \rho^n} = n \frac{(C_3)^{n-1}}{C_5}. \quad (4.7)$$

Como $\{\Lambda_j\}_{j=0,1,\dots,n}$ é uma base para o espaço \mathcal{P}_n^1 dos polinômios de grau menor ou igual a 1 definidos em \mathbb{R}^n , qualquer polinômio $\ell \in \mathcal{P}_n^1$ pode ser escrito como

$$\ell(x) = \sum_{j=0}^n \ell(y_j) \Lambda_j(x).$$

Em particular, para o polinômio constante $\ell(x) \equiv 1$, tem-se

$$1 = \sum_{j=0}^n \Lambda_j(x) = \Lambda_0(x) + \sum_{j=1}^n \Lambda_j(x).$$

Assim, usando isto e (4.7) tem-se que

$$|\Lambda_0(x)| = \left| 1 - \sum_{j=1}^n \Lambda_j(x) \right| \leq 1 + n \frac{(C_3)^{n-1}}{C_5}$$

e portanto,

$$\sum_{j=0}^n |\Lambda_j(x)| = |\Lambda_0(x)| + \sum_{j=1}^n |\Lambda_j(x)| \leq 1 + 2n \frac{(C_3)^{n-1}}{C_5}.$$

Assumindo

$$C_6 = 1 + 2n \frac{(C_3)^{n-1}}{C_5} > 0,$$

completa-se a demonstração. □

Lema 4.2 [17, Lema 1] *Considere Q^k o modelo na k -ésima iteração definido em (2.7). Se as Hipóteses H2, H3 e H5 são satisfeitas, então existe uma constante $C_7 > 0$ tal que*

$$\|\nabla Q^k(x^k) - \nabla F(x^k)\| \leq C_7 \rho.$$

Demonstração.

Considere $j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Como as funções F e Q^k são duas vezes diferenciáveis, pelo Teorema 1.5, ou seja, pela aproximação de Taylor com resto de Lagrange de ordem dois para ambas as funções em torno de $x^k = y_0 \in P^k$, existem t_1 e $t_2 \in (0, 1)$ tais que

$$F(y_j) = F(y_0) + \nabla F(y_0)^T (y_j - y_0) + \frac{1}{2} (y_j - y_0)^T \nabla^2 F[y_0 + t_1(y_j - y_0)] (y_j - y_0)$$

e

$$Q^k(y_j) = Q^k(y_0) + \nabla Q^k(y_0)^T (y_j - y_0) + \frac{1}{2} (y_j - y_0)^T \nabla^2 Q^k[y_0 + t_2(y_j - y_0)] (y_j - y_0).$$

Denotando as diferenças $(y_j - y_0)$ por d^j , para $j = 0, 1, \dots, n$, subtraindo as expressões obtidas acima e usando a condição de interpolação (2.8), tem-se

$$\{\nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0)\}^T d^j = \frac{1}{2} (d^j)^T \{\nabla^2 F(y_0 + t_1 d^j) - \nabla^2 Q^k(y_0 + t_2 d^j)\} d^j. \quad (4.8)$$

Considere $\Lambda_j(x)$ um polinômio linear com $\Lambda_j(y_i) = \delta_{ij}$, para $j = 0, 1, \dots, n$ e $i = 0, 1, \dots, n$, onde δ_{ij} é o delta de Kronecker. Multiplicando ambos os lados da igualdade (4.8) por $\Lambda_j(x)$, para cada $j = 0, 1, \dots, n$, somando-as e aplicando módulo em ambos os lados tem-se para todo $x \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{j=0}^n \{\nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0)\}^T d^j \Lambda_j(x) \right| = \\ & = \left| \sum_{j=0}^n \frac{1}{2} (d^j)^T \{\nabla^2 F(y_0 + t_1 d^j) - \nabla^2 Q^k(y_0 + t_2 d^j)\} d^j \Lambda_j(x) \right|, \end{aligned} \quad (4.9)$$

Daqui em diante, segue-se com a demonstração analisando a igualdade acima. Inicialmente, analisa-se o termo do lado direito de (4.9). Utilizando a desigualdade triangular, a desigualdade Cauchy-Schwarz e propriedades de norma de matriz, obtém-se

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{j=0}^n \frac{1}{2} (d^j)^T \{\nabla^2 F(y_0 + t_1 d^j) - \nabla^2 Q^k(y_0 + t_2 d^j)\} d^j \Lambda_j(x) \right| \\ & \leq \sum_{j=0}^n \frac{1}{2} \|d^j\|^2 \|\nabla^2 F(y_0 + t_1 d^j) - \nabla^2 Q^k(y_0 + t_2 d^j)\| |\Lambda_j(x)|. \end{aligned}$$

Além disso,

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^n \frac{1}{2} \|d^j\|^2 \|\nabla^2 F(y_0 + t_1 d^j) - \nabla^2 Q^k(y_0 + t_2 d^j)\| |\Lambda_j(x)| \\ & \leq \sum_{j=0}^n \frac{1}{2} \|d^j\|^2 \{ \|\nabla^2 F(y_0 + t_1 d^j)\| + \|\nabla^2 Q^k(y_0 + t_2 d^j)\| \} |\Lambda_j(x)|. \end{aligned}$$

Por hipótese, as Hessianas da função F e do modelo Q^k são uniformemente limitadas. Assim, existe uma constante $K > 0$, tal que $\|\nabla^2 F(x)\| \leq K$ e $\|\nabla^2 Q^k(x)\| \leq K$, para todo $x \in \mathbb{R}^n$. Usando isto e o Lema 3.9, existe $C_3 > 1$ tal que para todo $x \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{j=0}^n \frac{1}{2} (d^j)^T \{ \nabla^2 F(y_0 + t_1 d^j) - \nabla^2 Q^k(y_0 + t_2 d^j) \} d^j \Lambda_j(x) \right| \\ & \leq \sum_{j=0}^n \frac{1}{2} \|d^j\|^2 \{2K\} |\Lambda_j(x)| \\ & \leq C_3^2 \rho^2 K \sum_{j=0}^n |\Lambda_j(x)|. \end{aligned}$$

Usando isto e o Lema 4.1 tem-se que existe $C_6 > 0$ tal que para todo $x \in \mathbb{R}^n$, com $\|x - y_0\| \leq \rho$, vale

$$\left| \sum_{j=0}^n \frac{1}{2} (d^j)^T \{ \nabla^2 F(y_0 + t_1 d^j) - \nabla^2 Q^k(y_0 + t_2 d^j) \} d^j \Lambda_j(x) \right| \leq C_3^2 \rho^2 K C_6.$$

Assim, aplicando esta desigualdade na equação (4.9) tem-se a desigualdade

$$\left| \sum_{j=0}^n \{ \nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0) \}^T d^j \Lambda_j(x) \right| \leq C_3^2 \rho^2 K C_6. \quad (4.10)$$

Agora analisa-se o lado esquerdo da equação (4.9). Considere um polinômio linear dado por

$$\ell(x) = (x - y_0)^T \{ \nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0) \}. \quad (4.11)$$

Sendo um polinômio, este pode ser escrito unicamente como uma combinação linear dos polinômios de Lagrange $\Lambda_j(x)$. Mais formalmente, para $j = 0, 1, \dots, n$ tem-se

$$\ell(x) = \sum_{j=0}^n \ell(y_j) \Lambda_j(x). \quad (4.12)$$

Dado um índice $j \in \{0, 1, \dots, n\}$, ao avaliar a equação (4.11) em y_j obtém-se $\ell(y_j) = (y_j - y_0)^T \{ \nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0) \}$. Deste modo, substituindo $\ell(y_j)$ em (4.12) tem-se

$$\ell(x) = \sum_{j=0}^n (y_j - y_0)^T \{ \nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0) \} \Lambda_j(x).$$

Igualando a expressão acima com (4.11) e aplicando o módulo obtém-se que para $x \in \mathbb{R}^n$ vale

$$|(x - y_0)^T \{\nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0)\}| = \left| \sum_{j=0}^n (d^j)^T \{\nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0)\} \Lambda_j(x) \right|. \quad (4.13)$$

Note que o lado direito da expressão acima é exatamente o termo de interesse.

A igualdade (4.13) vale para todo $x \in \mathbb{R}^n$, em particular para

$$\bar{x} = y_0 + \rho \frac{\nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0)}{\|\nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0)\|_2}.$$

Substituindo x por \bar{x} na equação (4.13), obtém-se

$$\rho \|\nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0)\|_2 = \left| \sum_{j=0}^n (d^j)^T \{\nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0)\} \Lambda_j(\bar{x}) \right|. \quad (4.14)$$

Como (4.10) também é válida para todo $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|x - y_0\| \leq \rho$, tem-se que é válida em \bar{x} , uma vez que, $\|\bar{x} - y_0\| = \rho$. Assim, por (4.10) e (4.14), tem-se

$$\rho \|\nabla Q^k(y_0) - \nabla F(y_0)\|_2 \leq C_3^2 \rho^2 K C_6$$

e a demonstração está concluída com

$$C_7 = K C_3^2 C_6 > 0.$$

□

O próximo lema garante uma limitação superior para o passo de Cauchy, dado na Definição 1.16.

Lema 4.3 [17, (6.3)] *Considere $C_7 > 0$ a constante dada no Lema 4.2. Se Q^k e g^k são o modelo e seu gradiente, respectivamente, como definidos em (2.7), se as Hipóteses H2 - H5 são satisfeitas e se d_c^k é o passo de Cauchy, então*

$$Q^k(x^k + d_c^k) \leq Q^k(x^k) + \frac{1}{2} [-\|g^k\|_2 - \|\nabla F(x^k)\|_2 + (C_7 + M) \rho] \rho. \quad (4.15)$$

Demonstração.

O passo d_c^k de Cauchy é uma solução exata do problema (1.8), consequentemente o valor do modelo neste ponto não é maior do que em qualquer outro ponto dentro da região de confiança na direção do gradiente. Assim, considere $\bar{d} = -\rho \frac{g^k}{\|g^k\|_2}$ um múltiplo do passo d_c^k . Utilizando a descrição do modelo (2.7), obtém-se

$$Q^k(x^k + d_c^k) \leq Q^k(x^k - \bar{d}) = Q^k(x^k) - \rho \|g^k\|_2 + \frac{\rho^2}{2 \|g^k\|_2^2} g^{kT} G^k g^k.$$

Além disso, pela desigualdade Cauchy-Schwarz e pela limitação uniforme da Hessiana do modelo conforme Hipótese H2, tem-se

$$Q^k(x^k + d_c^k) \leq Q^k(x^k) - \rho \|g^k\|_2 + \frac{1}{2} \rho^2 M. \quad (4.16)$$

Por outro lado, de acordo com o Lema 4.2 tem-se

$$-\|g^k\|_2 + \|\nabla F(x^k)\|_2 \leq \|g^k - \nabla F(x^k)\|_2 \leq C_7\rho.$$

Multiplicando ambos os lados da desigualdade acima pela metade do raio, tem-se

$$-\frac{\rho}{2}\|g^k\|_2 \leq \frac{\rho}{2}[-\|\nabla F(x^k)\|_2 + C_7\rho]. \quad (4.17)$$

Desta maneira, utilizando a desigualdade (4.17) em uma das metades da norma de $\rho\|g^k\|_2$ da expressão (4.16) e reagrupando os termos, obtém-se (4.15) como desejado e o resultado está demonstrado. \square

O próximo resultado estabelece um limitante para a diferença em módulo da função e do modelo no ponto obtido ao longo de uma iteração qualquer.

Lema 4.4 [17, (6.6)] *Seja k o índice de uma iteração qualquer e sejam as constantes $C_7 > 0$, $M > 0$ e $N > 0$ dadas no Lema 4.2, em H2 e H4, respectivamente. Se a função objetivo F e o modelo que a interpola Q^k satisfazem as Hipóteses H2 - H5, então*

$$|Q^k(x^k + d^k) - F(x^k + d^k)| \leq \frac{1}{2}(2C_7 + M + N)\rho^2. \quad (4.18)$$

Demonstração.

Considere Q^k o modelo definido por (2.7). Pela aproximação de Taylor com resto de Lagrange de ordem dois do modelo em torno de x^k , existe $t \in (0, 1)$ tal que

$$Q^k(x^k + d^k) - Q^k(x^k) - \nabla Q^k(x^k)^T d^k = \frac{1}{2}(d^k)^T \nabla^2 Q^k(x^k + td^k) d^k.$$

Desta forma, aplicando módulo em ambos os lados e utilizando a desigualdade Cauchy-Schwarz no lado direito da igualdade anterior, obtém-se pela limitação uniforme da Hessiana do modelo e por $\|d^k\| \leq \rho$ que

$$|Q^k(x^k + d^k) - Q^k(x^k) - \nabla Q^k(x^k)^T d^k| \leq \frac{1}{2}M\rho^2. \quad (4.19)$$

Analogamente para a função objetivo F , como a Hipótese H5 é satisfeita, tem-se

$$|F(x^k + d^k) - F(x^k) - \nabla F(x^k)^T d^k| \leq \frac{1}{2}N\rho^2. \quad (4.20)$$

Eliminando o módulo das desigualdades (4.19) e (4.20), tem-se

$$Q^k(x^k + d^k) - Q^k(x^k) - \nabla Q^k(x^k)^T d^k \leq \frac{1}{2}M\rho^2$$

e

$$-F(x^k + d^k) + F(x^k) + \nabla F(x^k)^T d^k \leq \frac{1}{2}N\rho^2,$$

respectivamente.

Desta maneira, ao somar as desigualdades acima e utilizar a condição de interpolação dada em (2.8), obtém-se

$$Q^k(x^k + d^k) - F(x^k + d^k) - \nabla Q^k(x^k)^T d^k + \nabla F(x^k)^T d^k \leq \frac{1}{2}(M + N)\rho^2.$$

Aplicando novamente módulo na desigualdade acima, tem-se

$$|Q^k(x^k + d^k) - F(x^k + d^k)| - |\nabla Q^k(x^k)^T d^k - \nabla F(x^k)^T d^k| \leq \frac{1}{2}(M + N)\rho^2.$$

Com isso e a desigualdade Cauchy-Schwarz, tem-se

$$|Q^k(x^k + d^k) - F(x^k + d^k)| \leq \frac{1}{2}(M + N)\rho^2 + \|\nabla Q^k(x^k) - \nabla F(x^k)\| \|d^k\|.$$

Finalmente, pelo Lema 4.2, encontra-se exatamente a desigualdade desejada (4.18), concluindo a demonstração. \square

Considere para o lema seguinte a constante $C_8 > 0$ definida por

$$C_8 = \left(\frac{19}{9}C_7 + \frac{5}{4}M + \frac{5}{9}N \right) \max \{ \gamma; 1 \}, \quad (4.21)$$

onde $C_7 > 0$ é a constante definida no Lema 4.2, M e N são as constantes que limitam uniformemente as Hessianas do modelo e da função objetivo, respectivamente, e $\gamma > 0$ é o parâmetro definido na Seção 2.1.4. Antes de enunciar o próximo lema é conveniente analisar algumas consequências imediatas dessa constante.

Primeiramente, observe que de acordo com a definição de C_8 dada em (4.21), tem-se $-\frac{1}{2}C_8 \leq -\frac{19}{18}C_7 - \frac{5}{8}M - \frac{5}{18}N$. Desta maneira, reagrupando os termos obtém-se

$$\frac{1}{2}(-C_8 + C_7 + M) \leq -\frac{5}{9}C_7 - \frac{1}{8}M - \frac{5}{18}N \leq -\frac{1}{8}M. \quad (4.22)$$

Por outro lado, observe também que retirando a função máximo de (4.21) e utilizando o fato que $\frac{5}{4} > \frac{19}{18}$ obtém-se

$$C_8 \geq \frac{19}{9}C_7 + \frac{19}{18}M + \frac{5}{9}N.$$

Com isso, multiplicando ambos os lados da expressão acima por $\frac{9}{10}$ e reagrupando os termos, tem-se

$$\frac{9}{10} \left(C_8 - C_7 - \frac{1}{2}M \right) \geq C_7 + \frac{1}{2}(M + N). \quad (4.23)$$

Outro resultado é,

$$-\frac{9}{19}C_8 \leq -\left(C_7 + \frac{1}{2}M \right), \quad (4.24)$$

uma vez que eliminando a função máximo de (4.21) e multiplicando ambos os lados da desigualdade por $-\frac{9}{19}$ tem-se

$$-\frac{9}{19}C_8 \leq -C_7 - \frac{45}{76}M - \frac{5}{19}N \leq -C_7 - \frac{45}{76}M.$$

Como $-\frac{45}{76} \leq -\frac{1}{2}$ o resultado está provado. Finalmente, o último resultado a ser estabelecido é

$$C_8 - C_7 - \frac{1}{2}M > \gamma \left[C_7 + \frac{1}{2}(M + N) \right]. \quad (4.25)$$

De fato, suponha por contradição que (4.25) seja falsa. Logo

$$C_8 - C_7 - \frac{1}{2}M - \gamma \left(C_7 + \frac{1}{2}M + \frac{1}{2}N \right) \leq 0.$$

Usando (4.21) e reagrupando os termos tem-se

$$0 \geq \left(\frac{19}{9}C_7 + \frac{5}{4}M + \frac{5}{9}N \right) \max \{ \gamma; 1 \} - (1 + \gamma)C_7 - \frac{1}{2}(1 + \gamma)M - \frac{1}{2}\gamma N.$$

Trocando 1 e γ pelo máximo entre eles tem-se

$$0 \geq \left[\left(\frac{19}{9}C_7 + \frac{5}{4}M + \frac{5}{9}N \right) - 2C_7 - M - \frac{1}{2}N \right] \max \{ \gamma; 1 \}.$$

Assim,

$$0 \geq \left(\frac{1}{9}C_7 + \frac{1}{4}M + \frac{1}{18}N \right) \max \{ \gamma; 1 \},$$

que é uma contradição, uma vez que as constantes C_7, M, N e γ são positivas. Logo a desigualdade (4.25) é verdadeira.

O próximo resultado garante que, sobre algumas exigências, todas as tentativas de região de confiança são bem sucedidas. Recorde que uma tentativa de região de confiança é bem sucedida quando o passo d^k de região de confiança obtido nesta tentativa satisfaz as condições (2.12) e (2.13). Além disso, o valor $F(x^k + d^k)$ só é calculado se as duas desigualdades que constituem a primeira condição são satisfeitas.

Lema 4.5 [17, (6.2)] *Considere $C_8 > 0$ a constante definida em (4.21). Se as Hipóteses H2 - H5 são satisfeitas, a k -ésima iteração realiza uma tentativa de região de confiança e*

$$\|\nabla F(x^k)\| > C_8\rho, \quad (4.26)$$

então a tentativa de região de confiança é bem sucedida conforme Condição 2.2, onde ρ é o raio considerado na k -ésima iteração.

Demonstração.

Considere d^k o passo obtido por uma tentativa de região de confiança realizada na k -ésima iteração. Com base na Seção 2.2 conclui-se que d^k satisfaz as desigualdades presentes em (2.10). Assim, de acordo com a primeira condição de (2.10), pelo Lema 4.3 e por (4.26) tem-se

$$Q^k(x^k + d^k) \leq Q^k(x^k + d_c^k) < Q^k(x^k) + \frac{1}{2} [-\|g^k\|_2 + (-C_8 + C_7 + M)\rho] \rho,$$

onde $C_7 > 0$ e $M > 0$ são as constantes definidas no Lema 4.2 e em H2, respectivamente. Pela desigualdade (4.22), tem-se

$$Q^k(x^k + d^k) < Q^k(x^k) - \frac{1}{2}\|g^k\|_2 \rho - \frac{1}{8}M\rho^2. \quad (4.27)$$

Por outro lado, prova-se a seguir que quando $\|d\| < \frac{1}{2}\rho$, tem-se

$$Q^k(x^k + d) > Q^k(x^k) - \frac{1}{2}\|g^k\|_2 \rho - \frac{1}{8}M\rho^2. \quad (4.28)$$

De fato, de acordo com (2.7) e pela desigualdade Cauchy-Schwarz, tem-se

$$Q^k(x^k + d) \geq Q^k(x^k) - \|d\| \|g^k\| - \frac{1}{2}\|d\|^2 \|G^k\|.$$

Como $-\|d\| > -\frac{1}{2}\rho$ e como a Hipótese H2 é satisfeita, obtém-se a expressão desejada (4.28). Desta forma, como o passo d^k verifica (4.27), tem-se que o passo de região de confiança satisfaz $\|d^k\| \geq \frac{1}{2}\rho$. Assim, a segunda desigualdade da condição (2.12) é verificada.

Considere η^k definido em (2.11). Observe que os valores de η^k avaliam todas as diferenças obtidas com este raio até então. Logo são independentes das iterações, dependendo somente do raio da região de confiança, assim como o lado direito da expressão (4.18) provada no Lema 4.4. Desta maneira, juntando os dois resultados, obtém-se

$$\eta^k \leq (C_7 + \frac{1}{2}M + \frac{1}{2}N)\rho^2. \quad (4.29)$$

Por outro lado, como o passo de Cauchy d_c^k é uma solução exata do problema (1.8), tem-se que

$$Q^k(x^k + d_c^k) \leq Q^k\left(x^k - \rho \frac{g^k}{\|g^k\|_2}\right) = Q^k(x^k) - \rho \|g^k\|_2 + \frac{\rho^2}{2\|g^k\|_2^2} g^{kT} G^k g^k.$$

Pela desigualdade Cauchy-Schwarz e pela Hipótese H2, tem-se

$$Q^k(x^k + d_c^k) \leq Q^k(x^k) - \rho \|g^k\|_2 + \frac{1}{2}\rho^2 M. \quad (4.30)$$

Pelo Lema 4.2, tem-se que

$$-\|g^k\|_2 + \|\nabla F(x^k)\|_2 \leq \|g^k - \nabla F(x^k)\|_2 \leq C_7\rho. \quad (4.31)$$

Assim, ao substituir (4.31) em (4.30) e como $Q^k(x^k + d^k) \leq Q^k(x^k + d_c^k)$, tem-se

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq (C_8 - C_7 - \frac{1}{2}M)\rho^2, \quad (4.32)$$

uma vez que (4.26) é uma hipótese do lema. Deste modo, pela desigualdade (4.25),

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) > \gamma \left[C_7 + \frac{1}{2}(M + N) \right] \rho^2.$$

Logo com o resultado (4.29), tem-se $Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) > \gamma\eta^k$, que é a desigualdade que restava para satisfazer a condição (2.12). Consequentemente o valor de $F(x^k + d^k)$ é calculado nesta tentativa.

Agora basta mostrar que (2.13) é satisfeita. De fato, por (4.18) e (4.23) tem-se

$$|F(x^k + d^k) - Q^k(x^k + d^k)| \leq \frac{9}{10} \left(C_8 - C_7 - \frac{1}{2}M \right) \rho^2.$$

Eliminando o módulo e usando (4.32), tem-se

$$F(x^k + d^k) - Q^k(x^k + d^k) \leq \frac{9}{10} [Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k)].$$

Subtraindo $Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k)$ em ambos os lados e utilizando (2.8), obtém-se

$$- [F(x^k) - F(x^k + d^k)] \leq -0.1 [Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k)].$$

Logo a desigualdade (2.13) é satisfeita. Desta maneira, como as condições (2.12) e (2.13) são satisfeitas na tentativa de região de confiança realizada na k -ésima iteração que satisfaz (4.26), esta tentativa é bem sucedida como desejado.

□

Segue imeditamente do lema anterior que se a k -ésima iteração realiza uma tentativa de região de confiança e se a tentativa é mal sucedida, então

$$\|\nabla F(x^k)\| \leq C_8 \rho, \quad (4.33)$$

onde $C_8 > 0$ é definida em (4.21). Em outras palavras, uma consequência do lema é que existe uma subsequência dos naturais tal que a desigualdade (4.33) é válida nesta subsequência. Note que esta subsequência é formada pelos índices das iterações que realizam tentativas de região de confiança mal sucedidas e que a limitação depende dos raios considerados. Assim, a primeira parte para a prova da convergência fraca foi estabelecida.

4.1.2 A sequência com cada raio é finita

Apresenta-se agora a segunda parte para a demonstração da convergência fraca. Esta parte estabelece que a sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ gerada pelo Algoritmo 2.1 é finita para cada raio da região de confiança. Antes porém, convém determinar alguns resultados. O primeiro refere-se ao decréscimo suficiente da função num passo de região de confiança de sucesso.

Lema 4.6 [17, pág. 22] *Dado um raio ρ , suponha que \hat{a} seja a primeira iteração que considera o raio ρ tal que $\eta^{\hat{a}}$ seja positivo. Se a k -ésima iteração que considera o raio ρ é do tipo região de confiança de sucesso, com $k \geq \hat{a}$, então*

$$F(x^k) - F(x^k + d^k) \geq 0.1 \gamma \eta^{\hat{a}},$$

onde γ e η^k são definidos na Seção 2.1.4 e em (2.11), respectivamente.

Demonstração.

Seja \hat{a} o índice da primeira iteração que considera o raio ρ tal que $\eta^{\hat{a}}$ seja positivo. Assuma que a k -ésima iteração, com $k \geq \hat{a}$, realiza uma iteração de região de confiança bem sucedida e que considera o mesmo raio que a iteração de índice \hat{a} . Como a iteração é bem sucedida, tem-se que as desigualdades (2.12) e (2.13) são satisfeitas. Além disso, de acordo com (2.11) tem-se que para todo $k \geq \hat{a}$ vale $\eta^k \geq \eta^{\hat{a}}$. Assim

$$F(x^k) - F(x^k + d^k) \geq 0.1 [Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k)] > 0.1 \gamma \eta^k \geq 0.1 \gamma \eta^{\hat{a}},$$

o que completa a demonstração.

□

Para os próximos três lemas, são apresentadas anteriormente as consequências decorrentes do caso em que os valores de η^k são nulos para todas as iterações que consideram um determinado raio ρ fixo. Considere ν o índice da primeira iteração que utilizou o raio ρ e $\hat{\nu} = \nu + 5$. Ressalta-se que quando todos os valores de η^k são nulos para um determinado raio, os passos de região de confiança a partir da $\hat{\nu}$ -ésima iteração que considera este raio são soluções exatas dos problemas (2.9). Além disso, o Algoritmo 2.1 não atualiza o modelo de forma arbitrária. Nesta situação, tem-se para $k \geq \hat{\nu}$ que $Q^{k+1} = Q^k$, o que é razoável uma vez que $F(x^k + d^k) = Q^k(x^k + d^k)$. Decorrente disto, observe que todas as iterações de índice $k \geq \hat{\nu}$ que utilizam o mesmo raio satisfazem $Q^k = Q^{\hat{\nu}}$. Além disso, cada diferença $F(x^k) - F(x^k + d^k)$ é a mesma que $Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k)$. Assim, se (2.12) for satisfeita, então (2.13) sempre será satisfeita. Portanto, as condições para um passo de região de confiança ser bem sucedido, (2.12) e (2.13), se tornam apenas

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) > 0 \quad \text{e} \quad \|d^k\| \geq \frac{1}{2}\rho. \quad (4.34)$$

Além disso, como $\eta^k = 0$, para todas as iterações de índice $k \geq \hat{\nu}$ que consideram este raio, pode-se estabelecer expressões para o gradiente e a Hessiana dos modelos. Assim, como $Q^k = Q^{\hat{\nu}}$

$$g^k = \nabla Q^{\hat{\nu}}(x^k) = g^{\hat{\nu}} + G^k(x^k - x^{\hat{\nu}}) \quad (4.35)$$

e

$$G^k = \nabla^2 Q^{\hat{\nu}}(x^k) = G^{\hat{\nu}}.$$

Os resultados seguintes abrangem o caso em que todos os valores de η^k são nulos para todas as iterações que consideram um determinado raio. Esta análise é feita para diferentes tipos de modelos. O primeiro resultado fornece um limitante para a diferença do modelo no ponto atual e no obtido durante uma iteração de região de confiança para modelos quadráticos não convexos.

Lema 4.7 [17, pág. 23] *Considere que a k -ésima iteração utiliza o raio ρ e realiza uma tentativa de região de confiança bem sucedida, com $k \geq \nu + 5$ onde ν é o índice da primeira iteração que utiliza o raio ρ , e que $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ sejam os autovalores da Hessiana G^k do modelo. Se $\eta^k = 0$ e $\lambda_1 < 0$, então*

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq \frac{1}{2} |\lambda_1| \rho^2.$$

Demonstração.

Como $\lambda_1 < 0$, tem-se que o modelo é ilimitado inferiormente. Além disso, como $\eta^k = 0$ e $k \geq \nu + 5$, o passo d^k é a solução exata do problema (2.9). Desta forma, o passo d^k está na fronteira da região de confiança, pois, caso contrário, como d^k é o passo que minimiza o modelo a partir de x^k , se este estivesse no interior da região o ponto $x^k + d^k$ seria minimizador do modelo, o que é uma contradição com $\lambda_1 < 0$.

Considere v_1 o autovetor de G^k associado ao autovalor λ_1 tal que $\|v_1\| = \rho$ e $v_1^T g^k \leq 0$. Observe que o vetor v_1 está bem definido, uma vez que, se u é autovetor de uma matriz qualquer associado a um autovalor, então tu também é autovetor da mesma matriz associado ao mesmo autovalor, para $t \in \mathbb{R}^n$. Como d^k é solução exata do problema (2.9) e $\|v_1\| = \rho$, tem-se

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq Q^k(x^k) - Q^k(x^k + v_1) = -v_1^T g^k - \frac{1}{2} \lambda_1 \|v_1\|_2^2,$$

completando a demonstração, uma vez que $-v_1^T g^k \geq 0$, $\|v_1\| = \rho$ e $\lambda_1 < 0$.

□

Agora, encontra-se um limitante como no lema anterior, porém para modelos convexos ilimitados inferiormente. Antes porém, convém ressaltar o seguinte resultado.

Se o modelo Q^k , como descrito em (2.7), é ilimitado inferiormente e G^k é semidefinida positiva, então pelo Lema 1.13, g^k não pertence ao subespaço gerado pelos autovetores associados aos autovalores positivos de G^k . Equivalentemente, existe um vetor $w \in \mathcal{N}(G^k)$ tal que $\|w\| = 1$ e $\omega^T g^k > 0$.

Lema 4.8 *Considere $k \geq \hat{\nu}$ o índice de uma iteração de região de confiança bem sucedida com raio ρ e $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ os autovalores da Hessiana G^k do modelo, onde $\hat{\nu} = \nu + 5$ e ν é o índice da primeira iteração que considerou o raio ρ . Suponha que $\eta^k = 0$, $\lambda_1 = 0$ e que o modelo Q^k é ilimitado inferiormente. Então existe $\omega \in \mathcal{N}(G^k)$, $\|\omega\| = 1$ e $\omega^T g^{\hat{\nu}} > 0$, tal que*

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq \rho (g^{\hat{\nu}})^T \omega.$$

Demonstração.

Primeiramente, note que como $\lambda_1 = 0$ a matriz G^k é semidefinida positiva. Além disso, como Q^k é ilimitado inferiormente, tem-se pelo Lema 1.13 que existe $\omega \in \mathcal{N}(G^k)$ tal que $\|\omega\| = 1$ e $\omega^T g^k > 0$.

Como $\eta^k = 0$, por (4.35) tem-se

$$\omega^T g^k = \omega^T [g^{\hat{\nu}} + G^k(x^k - x^{\hat{\nu}})] = \omega^T g^{\hat{\nu}}. \quad (4.36)$$

Como d^k é solução exata de (2.9), tem-se

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq Q^k(x^k) - Q^k(x^k - \rho\omega).$$

Além disso, por (2.7), tem-se

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq -(g^k)^T (-\rho\omega) - \frac{1}{2}\rho^2 \omega^T G^k \omega.$$

Finalmente, como ω pertence ao núcleo de G^k , por (4.36) a prova está concluída.

□

O próximo lema apresenta resultados para os tipos de modelos ainda não analisados, ou seja, limitados inferiormente.

Lema 4.9 [17, (6.14)] *Dado um raio ρ , seja ν o índice da primeira iteração que considera este raio e $\hat{\nu} = \nu + 5$. Considere $k \geq \hat{\nu}$ o índice de uma iteração de região de confiança bem sucedida com raio ρ , $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ os autovalores da Hessiana G^k do modelo e λ_ℓ o menor autovalor positivo. Se $\eta^k = 0$, o modelo Q^k é limitado inferiormente, a Hipótese H2 e a condição*

$$\|g^k\| = \|\nabla Q^{\hat{\nu}}(x^k)\| \geq \rho\lambda_\ell \quad (4.37)$$

são satisfeitas, então

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq \frac{(\rho\lambda_\ell)^2}{2M}.$$

Demonstração.

Dada a direção $d = -\frac{g^k}{\|g^k\|}$, mostra-se a seguir que, $t \in \left[0, \frac{\rho\lambda_\ell}{M}\right]$, o modelo $Q^{\hat{\nu}}(x^k + td)$ decresce monotonicamente. De fato,

$$\frac{d}{dt}Q^{\hat{\nu}}(x^k + td) = d^T [g^{\hat{\nu}} + G^{\hat{\nu}}(x^k + td - x^{\hat{\nu}})].$$

Note que por (4.35) e pela expressão de d , tem-se

$$\frac{d}{dt}Q^{\hat{\nu}}(x^k + td) \leq \left(-\frac{g^k}{\|g^k\|}\right)^T \left[g^k + tG^{\hat{\nu}}\left(-\frac{g^k}{\|g^k\|}\right)\right].$$

Pela desigualdade Cauchy-Schwarz, pela limitação uniforme da Hessiana do modelo $Q^{\hat{\nu}}$ e por (4.37), tem-se

$$\frac{d}{dt}Q^{\hat{\nu}}(x^k + td) \leq -\|g^k\| + \frac{t}{\|g^k\|^2}g^{kT}G^k g^k \leq -\|g^k\| + tM \leq -\rho\lambda_\ell + tM \leq 0.$$

Para $t = \frac{\rho\lambda_\ell}{M}$ o passo td pertence à região de confiança, uma vez que pelo Lema 1.15 $\lambda_\ell \leq M$ e conseqüentemente $\|td\| = \frac{\rho\lambda_\ell}{M} \leq \rho$. Note que como $d = -\frac{g^k}{\|g^k\|}$, $t = \frac{\lambda_\ell\rho}{M}$ e $\|g^k\| \geq \rho\lambda_\ell$, tem-se facilmente que

$$t\|g^k\| - \frac{1}{2}t^2d^TG^kd + \frac{1}{2}td^Tg^k \geq 0.$$

Com isso,

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq Q^k(x^k) - Q^k(x^k + td) = t\|g^k\| - \frac{1}{2}t^2d^TG^kd \geq -\frac{1}{2}td^Tg^k = \frac{1}{2}\frac{\rho\lambda_\ell}{M}\|g^k\|.$$

Como $\|g^k\| \geq \rho\lambda_\ell$ o lema está demonstrado. □

Finalmente, o próximo resultado apresenta a segunda parte da demonstração da convergência fraca do método. Estabelece-se nesta parte que o número de iterações com cada raio é finito.

Antes de enunciar o lema é introduzida a essência da demonstração. Suponha que a função objetivo F seja limitada inferiormente. Como por (2.5) a sequência $(F(x^k))_{k \in \mathbb{N}}$ decresce monotonicamente, tem-se

$$\lim_{k \rightarrow \infty} [F(x^k) - F(x^k + d^k)] = 0. \quad (4.38)$$

Assim, apresentam-se no lema seguinte várias situações em que cada passo de região de confiança d^k bem sucedido com o atual raio ρ satisfaz a propriedade

$$F(x^k) - F(x^k + d^k) \geq \hat{c}, \quad (4.39)$$

com a constante $\hat{c} > 0$ dependendo de ρ e não de k . Assim, conclui-se juntamente com (4.38) que o número de passos de região de confiança de sucesso com o atual raio ρ é

finito. Consequentemente, como em cada série de $3n + 3$ iterações consecutivas com o raio ρ fixo, pelo menos uma delas é de região de confiança bem sucedida, tem-se que as seqüências de iterações para cada raio ρ terminam como desejado.

Lema 4.10 [17, Lema 4] *Se as Hipóteses H2 - H5 são satisfeitas, então o número de iterações com cada raio da região de confiança é finito.*

Demonstração.

Considere $\rho > 0$ o raio corrente a partir da iteração ν e a constante $\hat{\nu} = \nu + 5$. Separa-se a demonstração em alguns casos baseados nos modelos Q^k , para $k \geq \hat{\nu}$. Em cada caso obtém-se uma expressão para a constante \hat{c} que garante que (4.39) é satisfeita.

Primeiramente, suponha que η^k se torne positivo durante as iterações com o raio ρ e considere $\hat{\eta}$ o primeiro valor positivo. Se $k \geq \hat{\eta}$ é o índice de uma iteração de região de confiança bem sucedida com o raio ρ , então pelo Lema 4.6 tem-se $\hat{c} = 0.1\gamma\eta^{\hat{\eta}} > 0$ na desigualdade (4.39). Logo, como o tamanho do raio não aumenta, tem-se que a quantidade de iterações de região de confiança bem sucedidas com este raio é finita.

Suponha agora que η^k seja nulo em todas as iterações com o raio ρ . Neste caso, como $k \geq \hat{\nu}$ todos os passos de região de confiança são soluções exatas do problema (2.9). Além disso, todas as iterações que consideram este raio possuem o modelo igual a $Q^{\hat{\nu}}$. Considere $k \geq \hat{\nu}$ uma iteração de região de confiança bem sucedida que utiliza o raio ρ e $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ os autovalores da matriz Hessiana G^k do modelo. Para este caso são estudados três subcasos.

Primeiro, quando $\lambda_1 < 0$, pelo Lema 4.7 basta tomar $\hat{c} = \frac{1}{2} |\lambda_1| \rho^2$ na desigualdade (4.39). Agora, para o segundo caso, quando $\lambda_1 = 0$ e $Q^k = Q^{\hat{\nu}}$ é ilimitado inferiormente, tem-se pelo Lema 1.13 que existe $\omega \in \mathcal{N}(G^k)$ tal que $\|\omega\| = 1$ e $\omega^T g^{\hat{\nu}} > 0$. Logo pelo Lema 4.8 tem-se $\hat{c} = \rho \omega^T g^{\hat{\nu}}$ em (4.39). Finalmente, quando $Q^{\hat{\nu}}$ é limitado inferiormente, tem-se pelo Lema 4.9 que se λ_ℓ é o primeiro autovalor positivo da Hessiana do modelo Q^k e $\|g^k\| \geq \lambda_\ell \rho$, então $\hat{c} = (\rho \lambda_\ell)^2 / (2M)$ na desigualdade (4.39). Logo, o número de iterações de região de confiança bem sucedidas para este caso é finito. Consequentemente, para k suficientemente grande, tem-se que $\|g^k\| < \lambda_\ell \rho$.

Para concluir a análise do último caso, falta mostrar que o número de iterações de região de confiança bem sucedidas com o raio ρ também é finito quando $\|g^k\| < \lambda_\ell \rho$. Para tal, são investigados os vetores d que satisfazem

$$\nabla Q^{\hat{\nu}}(x^k + d) = g^k + G^{\hat{\nu}} d = 0, \quad (4.40)$$

quando $Q^{\hat{\nu}}$ é limitado inferiormente. Pelo Lema 1.15 tem-se que esses vetores existem, pois g^k está no espaço coluna da $G^{\hat{\nu}}$. Assim, de acordo com (4.40) e pelo Lema 1.15 tem-se

$$\|g^k\| = \|G^{\hat{\nu}} d\| \geq \lambda_\ell \|d\|.$$

Com isso, se $\|g^k\| < \lambda_\ell \rho$, então d está na região de confiança, isto é, $\|d\| < \rho$. Logo, para k suficientemente grande, tem-se que um passo d^k pode satisfazer $\nabla Q^{\hat{\nu}}(x^k + d^k) = 0$. Consequentemente, $Q^{\hat{\nu}}(x^k + d^k) \leq Q^{\hat{\nu}}(x)$, para $x \in \mathbb{R}^n$. Além disso, se durante as iterações com o raio ρ , $Q^{\hat{\nu}}(x^k + d^k) \leq Q^{\hat{\nu}}(x)$ é satisfeita para todo $x \in \mathbb{R}^n$, então (4.34) não é satisfeita. Logo $x^{k+1} = x^k$. Assim, não existem mais passos de região de confiança de sucesso para este caso com o raio ρ . Note que este caso abrange o caso em que $Q^{\hat{\nu}}$ é uma função constante.

Note que o caso em que $\lambda_1 = 0$ e o modelo é ilimitado inferiormente garante o resultado quando o modelo é linear.

Deste modo, como o número de iterações de região de confiança bem sucedidas é finito com o raio ρ tem-se pelos resultados R8 e R13 que a demonstração está concluída. \square

Corolário 4.11 *Se a sequência gerada pelo Algoritmo 2.1 satisfaz as Hipóteses H1 - H5, então*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \rho^k = 0. \quad (4.41)$$

Demonstração.

Como a sequência dos raios é monótona não crescente, o resultado segue imediatamente das Hipóteses H1 - H5 e do Lema 4.10. \square

Decorrente dos Lemas 4.5 e 4.10 apresenta-se a convergência fraca no próximo corolário.

Corolário 4.12 *Considere $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ uma sequência gerada pelo Algoritmo 2.1. Se as Hipóteses H1 - H5 são satisfeitas, então*

$$\liminf \|\nabla F(x^k)\| = 0. \quad (4.42)$$

Demonstração.

Considere \mathbb{N}' uma subsequência do conjunto dos naturais, de modo que esta seja constituída apenas dos índices das iterações que realizaram tentativas de região de confiança mal sucedidas. Sabe-se pelo Lema 4.5 que a desigualdade (4.33) é válida para todo $k \in \mathbb{N}'$. Além disso, pelo Corolário 4.11, tem-se a desigualdade (4.41), o que conclui a prova. \square

Sabe-se que o passo de região de confiança, definido na Condição 2.1, é uma solução exata do problema (2.9) quando a expressão (2.11) é nula na iteração k , com $k \geq \hat{\nu}$, onde $\hat{\nu} = \nu + 5$ e ν é o primeiro índice que considerou o raio utilizado na iteração k . A razão para a exigência de uma solução exata neste caso é forçar o algoritmo a parar. Apresenta-se o propósito da solução exata no exemplo a seguir.

Considere a função quadrática $F : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$F(x) = x_1^2 + 3x_2^2 + 0x_3^2,$$

onde $x = (x_1, x_2, x_3)^T \in \mathbb{R}^3$. Considere também que o raio inicial da região de confiança seja $\rho = 2$, que o primeiro modelo quadrático Q^1 seja equivalente à função F , isto é, $Q^1 \equiv F$, que as Hessianas dos modelos sejam a própria Hessiana da função F no ponto x^k e que o primeiro termo x^1 da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ seja próximo o suficiente da origem de modo que todo passo de Cauchy, dado na Definição 1.16, tenha tamanho menor ou igual a um. Mostra-se no exemplo que se não se exige que um passo de região de confiança seja exato, então o número de iterações com o raio inicial pode ser infinito. De fato, neste exemplo mostra-se que todas as iterações de região de confiança são de sucesso e

consequentemente o raio nunca é alterado. Deste modo, como o raio é constante, o critério de parada do Algoritmo 2.1 nunca é verificado mesmo que a solução seja encontrada.

Observe que como $Q^1 \equiv F$, tem-se $Q^1(x^1 + d^1) = F(x^1 + d^1)$. Além disso, como $G^k = \nabla^2 F(x^k)$ para todo k segue por indução que $Q^k \equiv F$, para $k \geq 1$. Desta maneira, tem-se $\eta^k = 0$ para todo $k \geq 1$. Assim, segundo o Algoritmo 2.1 os passos de região de confiança devem ser soluções exatas do problema (2.9) para iterações de índices superiores a $\nu + 5$ para cada raio considerado, onde ν é o índice da primeira iteração que considerou o raio utilizado na iteração k . Suponha que esta exigência não exista e considere cada passo d^k como sendo

$$d^k = d_c^k + e_3, \quad (4.43)$$

onde d_c^k é o passo de Cauchy, dado na Definição 1.16, e $e_3 = (0, 0, 1)^T \in \mathbb{R}^3$.

Como F e Q^k são independentes da terceira coordenada, mostra-se que

$$Q^k(x^k + d^k) = Q^k(x^k + d_c^k) \quad \text{e} \quad \frac{1}{2}\rho < \|d^k\| \leq \rho. \quad (4.44)$$

De fato, a igualdade é trivial uma vez que $d^k = ((d_c^k)_1, (d_c^k)_2, 1)^T$. Para as desigualdades, por (4.43), pela desigualdade triangular e por $\|d_c^k\| \leq 1$ tem-se

$$\|d^k\| \leq \|d_c^k\| + \|e_3\| \leq 2 = \rho.$$

Por outro lado, como $d_c^k = -t^k g^k$, onde t^k é solução de (1.8), e como g^k é independente da terceira coordenada, tem-se que d_c^k também o é. Consequentemente, o vetor e_3 é ortogonal ao passo d_c^k . Assim, por Pitágoras obtém-se que

$$\|d^k\|^2 = \|d_c^k\|^2 + \|e_3\|^2 > \|e_3\|^2 = 1.$$

Portanto, $\|d^k\| > 1 = \frac{\rho}{2}$. Logo o passo d^k dado por (4.43) satisfaz (4.44).

Desta maneira, como (4.44) é válida, tem-se que a diferença $Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k)$ é positiva para qualquer $k \in \mathbb{N}$. Desta forma, o valor de $F(x^k + d^k)$ é calculado, uma vez que (2.12) é satisfeita, pois $\eta^k = 0$. Além disso, como $F \equiv Q^k$, tem-se que a diferença $F(x^k) - F(x^k + d^k)$ é exatamente o número positivo $Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k)$ e consequentemente a condição (2.13) é satisfeita, para todo $k \in \mathbb{N}$. Deste modo, todos os passos de região de confiança d^k , dados por (4.43), são aceitos para $k \in \mathbb{N}$. Assim, o raio considerado ao longo de todas as iterações é sempre $\rho = 2$ e a condição para terminar a sequência de iterações nunca é atingida.

Suponha que o ponto inicial x^1 da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ seja $(1, 1/3, 0)^T$, que as iterações do tipo *alpha* e *beta* não alteram o centro da região de confiança e ainda, que o passo de região de confiança seja como descrito em (4.43).

Como as únicas iterações que alteram o centro da região são as de região de confiança e todas são de sucesso, obtém-se uma fórmula geral para os pontos da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ que dependem das iterações de região de confiança. Deste modo, se na iteração de índice k é realizada a j -ésima iteração de região de confiança bem sucedida, então prova-se que o ponto obtido nesta iteração é da seguinte forma,

$$x^{k+1} = \left(\frac{1}{2^j}, \frac{1}{3(-2)^j}, j \right).$$

De fato, de acordo com a Definição 1.16 sabe-se que $d_c^k = -t^k g^k$, onde t^k é solução de (1.8). Conforme [8], sabe-se que

$$t^k = \frac{(g^k)^T g^k}{(g^k)^T G^k g^k}, \quad (4.45)$$

onde g^k e G^k são o gradiente e a Hessiana de cada modelo Q^k , para $k \in \mathbb{N}$, respectivamente. Utilizando o gradiente e a Hessiana de F , tem-se que

$$t^k = \frac{4(x_1^k)^2 + 36(x_2^k)^2}{8(x_1^k)^2 + 216(x_2^k)^2}.$$

Segue a prova por indução nas iterações de região de confiança. Suponha que a primeira iteração de região de confiança tenha índice ℓ . Deste modo, tem-se que $t^\ell = 1/4$ e assim, $x^{\ell+1} = (1/2, -1/6, 1)^T$. Suponha como hipótese de indução que para a j -ésima iteração de região de confiança realizada na iteração k tem-se $x^{k+1} = (2^{-j}, [3(-2)^j]^{-1}, j)$. Utilizando as expressões (4.43) e (4.45), tem-se facilmente que o resultado é válido. Com este exemplo, pode-se ver que sem a exigência de um passo de região de confiança exato, o algoritmo não para mesmo que a sequência esteja próxima de algum dos pontos estacionários, que têm a forma $(0, 0, a)$, para qualquer $a \in \mathbb{R}$.

4.2 Convergência forte

No decorrer dessa seção demonstra-se o resultado principal deste trabalho, a convergência do Algoritmo 2.1. Para estabelecer a convergência são adotadas as Hipóteses H1-H5. Além disso, algumas considerações são feitas antes de enunciar o primeiro lema.

Dado um número positivo ϵ , considere $k(\epsilon)$ o menor inteiro positivo, tal que o raio na $k(\epsilon)$ -ésima iteração satisfaça

$$\rho \leq \frac{5\epsilon}{9C_8}, \quad (4.46)$$

onde $C_8 > 0$ é a constante definida em (4.21). Como a Hipótese H1 é satisfeita e pelo Corolário 4.11 o raio tende a zero, tem-se que $k(\epsilon)$ está bem definido. Para facilitar a notação, denote $k(\epsilon)$ simplesmente por k_ϵ , mesmo que para cada ϵ tem-se um k_ϵ fixo diferente. A notação k_ϵ é considerada nos demais lemas dessa seção.

Note que, como os raios das regiões de confiança não aumentam, para toda iteração de índice k , com $k \geq k_\epsilon$, o raio considerado nessas iterações também satisfazem (4.46).

O primeiro resultado fornece um limitante superior para a norma das diferenças dos gradientes da função objetivo em pontos consecutivos da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$, gerada pelo Algoritmo 2.1.

Lema 4.13 [17, (7.5)] *Dado $\epsilon > 0$, considere $k_\epsilon \in \mathbb{N}$ o índice da primeira iteração em que o raio ρ , utilizado nesta iteração, satisfaz (4.46). Se as Hipóteses H1 – H5 são satisfeitas, então toda iteração de índice k com $k \geq k_\epsilon$ satisfaz*

$$\|\nabla F(x^{k+1}) - \nabla F(x^k)\| \leq \epsilon. \quad (4.47)$$

Demonstração.

Como a Hessiana de F é uniformemente limitada por N , tem-se pela Desigualdade do Valor Médio, enunciada no Teorema 1.6, que para toda iteração de índice k vale

$$\|\nabla F(x^{k+1}) - \nabla F(x^k)\| \leq N\rho,$$

uma vez que, $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \rho$. Além disso, para $k \geq k_\epsilon$, tem-se que o raio nessas iterações satisfazem (4.46). Logo, para todo $k \geq k_\epsilon$

$$\|\nabla F(x^{k+1}) - \nabla F(x^k)\| \leq N \frac{5\epsilon}{9C_8},$$

onde $C_8 > 0$ é a constante definida em (4.21). Por outro lado, como $C_8 \geq \frac{19}{9}C_7 + \frac{5}{4}M + \frac{5}{9}N$, $C_7 > 0$ e $M > 0$, tem-se $\frac{5N}{9C_8} \leq 1$, onde C_7 e M são as constantes definidas no Lema 4.2 e na Hipótese H2, respectivamente, e o lema está demonstrado. \square

O próximo resultado garante que dado $\epsilon > 0$ e k_ϵ , como descrito no parágrafo que contém a expressão (4.46), se a norma do gradiente num ponto da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ é limitada inferiormente, então toda tentativa de região de confiança é bem sucedida, desde que as iterações tenham índices superiores a k_ϵ .

Lema 4.14 [17, (7.4)] *Dado $\epsilon > 0$, considere $k_\epsilon \in \mathbb{N}$ como no lema anterior. Se a Hipótese H2 é satisfeita, a k -ésima iteração realiza uma tentativa de região de confiança, com $k \geq k_\epsilon$, e*

$$\|\nabla F(x^k)\| \geq \epsilon, \quad (4.48)$$

então essa tentativa é bem sucedida e

$$F(x^k) - F(x^k + d^k) \geq \frac{7}{95}\rho\epsilon. \quad (4.49)$$

Demonstração.

Seja $k \geq k_\epsilon$ o índice de uma iteração que realiza uma tentativa de região de confiança e que satisfaz (4.48). Como o raio na iteração k satisfaz (4.46), tem-se que

$$\|\nabla F(x^k)\| \geq \epsilon \geq \frac{9}{5}C_8\rho > C_8\rho,$$

onde $C_8 > 0$ é a constante definida em (4.21). Deste modo, a hipótese necessária para a demonstração do Lema 4.5 é satisfeita. Consequentemente a tentativa de região de confiança na iteração k é bem sucedida.

Por outro lado, como d_c^k é o passo de Cauchy, tem-se que

$$Q^k(x^k + d_c^k) \leq Q^k\left(x^k - \rho \frac{g^k}{\|g^k\|_2}\right) = Q^k(x^k) - \rho \|g^k\|_2 + \frac{\rho^2}{2\|g^k\|_2^2} g^{kT} G^k g^k.$$

Pela desigualdade Cauchy-Schwarz e pela Hipótese H2, tem-se

$$Q^k(x^k + d_c^k) \leq Q^k(x^k) - \rho \|g^k\|_2 + \frac{1}{2}\rho^2 M.$$

Desta maneira, com o Lema 4.2, obtém-se

$$-\|g^k\|_2 + \|\nabla F(x^k)\|_2 \leq \|g^k - \nabla F(x^k)\|_2 \leq C_7\rho.$$

Assim, juntando as duas desigualdades e usando o fato que $Q^k(x^k + d^k) \leq Q^k(x^k + d_c^k)$, tem-se

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq (\|\nabla F(x^k)\| - C_7\rho) \rho + \frac{1}{2}\rho^2 M.$$

Deste modo, com esta desigualdade e (4.48), tem-se

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq \rho\epsilon - \left(C_7 + \frac{1}{2}M\right) \rho^2,$$

onde as constantes $C_7 > 0$ e $M > 0$ são dadas no Lema 4.2 e na Hipótese H2, respectivamente. Como $k \geq k_\epsilon$, tem-se que a desigualdade (4.46) é satisfeita para o raio considerado na iteração k . Desta maneira, tem-se

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq \rho\epsilon \left[1 - \left(C_7 + \frac{1}{2}M\right) \frac{5}{9C_8}\right].$$

Além disso, por (4.24), obtém-se

$$Q^k(x^k) - Q^k(x^k + d^k) \geq \rho\epsilon \left(1 - \frac{5}{19}\right). \quad (4.50)$$

Por outro lado, como k é uma iteração de região de confiança bem sucedida, tem-se que a desigualdade (2.13) é satisfeita. Desta maneira, por (4.50) tem-se

$$F(x^k) - F(x^{k+1}) \geq 0.1\rho\epsilon \left(\frac{14}{19}\right) = \frac{7}{95}\rho\epsilon,$$

e o resultado está provado. □

Dado $\epsilon > 0$, considere k_ϵ o menor inteiro positivo tal que o raio ρ , utilizado na k_ϵ -ésima iteração, satisfaz (4.46). Denote por $\ell \geq k_\epsilon + 2$ o índice de uma iteração tal que

$$\|\nabla F(x^\ell)\| > 10\epsilon, \quad (4.51)$$

e por m o menor inteiro maior que ℓ tal que

$$\|\nabla F(x^{m+1})\| < \epsilon. \quad (4.52)$$

Os próximos quatro resultados estabelecem relações para todas as iterações realizadas entre as iterações de índices ℓ e m .

Uma consequência direta das escolhas dos índices ℓ e m é

$$\|\nabla F(x^{m+1}) - \nabla F(x^\ell)\| \geq \|\nabla F(x^\ell)\| - \|\nabla F(x^{m+1})\| > 10\epsilon - \epsilon = 9\epsilon. \quad (4.53)$$

Por outro lado, de acordo com o Lema 4.13, obtém-se

$$\|\nabla F(x^{m+1}) - \nabla F(x^\ell)\| = \left\| \sum_{i=1}^{m+1-\ell} [\nabla F(x^{\ell+i}) - \nabla F(x_{\ell+i-1})] \right\| \leq (m+1-\ell)\epsilon.$$

Assim, $9\epsilon < (m+1-\ell)\epsilon$ e consequentemente,

$$m \geq 9 + \ell. \quad (4.54)$$

O próximo lema estabelece que todas as tentativas de região de confiança entre duas iterações particulares são bem sucedidas.

Lema 4.15 [17, pág. 25] *Dado $\epsilon > 0$, seja k_ϵ o número da primeira iteração em que o raio satisfaz (4.46). Considere ℓ e m índices de duas iterações, com $k_\epsilon + 2 \leq \ell$ tal que ℓ satisfaça (4.51) e que m seja o menor inteiro maior que ℓ tal que (4.52) seja válida. Então todas as tentativas de região de confiança de índices k , com $\max\{\nu; \ell - 2\} \leq k \leq m$, são bem sucedidas.*

Demonstração.

De fato, de acordo com as escolhas para ℓ e m , tem-se que

$$\|F(x^k)\| \geq \epsilon, \quad (4.55)$$

para toda iteração de índice k com $\ell \leq k \leq m$, uma vez que m é o menor inteiro maior que ℓ tal que (4.52) é satisfeita. Por outro lado, pelo Lema 4.13, a desigualdade (4.47) é satisfeita para toda iteração de índice maior que k_ϵ e por (4.51), obtém-se

$$\epsilon \geq \|\nabla F(x^\ell) - \nabla F(x^{\ell-1})\| > 10\epsilon - \|\nabla F(x^{\ell-1})\|,$$

o que implica que $\|\nabla F(x^{\ell-1})\| > 9\epsilon$. Analogamente, tem-se $\|\nabla F(x^{\ell-2})\| > 8\epsilon$. Desta maneira, a desigualdade (4.55) é válida para toda iteração k com $\max\{\nu; \ell - 2\} \leq k \leq m$. Consequentemente, de acordo com o Lema 4.14 tem-se que todas as tentativas de região de confiança realizadas neste intervalo são bem sucedidas e o resultado está demonstrado. \square

Verifica-se no próximo corolário que todas as iterações entre essas duas iterações específicas ℓ e m , consideram o mesmo raio.

Corolário 4.16 [17, pág. 25] *Sejam ℓ e m índices de duas iterações, como considerados no lema anterior. Então todas as iterações de índices entre ℓ e m inclusive, consideram o mesmo raio.*

Demonstração.

De fato, suponha por contradição que o raio não seja constante ao longo dessas iterações. Logo existe uma iteração de índice j , com $\max\{\nu; \ell - 2\} \leq j \leq m$, que realiza uma tentativa mal sucedida de região de confiança, onde ν é o índice da primeira iteração que emprega o corrente raio ρ . Observe que ao invés de analisar as iterações que realizam tentativas *beta* de insucesso, nas quais o raio é alterado, concentra-se o estudo nas iterações que realizam tentativas de região de confiança mal sucedidas, as quais, de acordo com o resultado R8, também são uma exigência para que o raio mude. Por este motivo, considera-se a iteração $\ell - 2$ e o máximo entre esta e a iteração ν .

De acordo com o Lema 4.15 todas as tentativas de região de confiança realizadas neste intervalo são bem sucedidas, o que contradiz a hipótese de absurdo. \square

O resultado a seguir apresenta uma quantidade mínima de iterações de região de confiança realizadas entre as iterações de índices ℓ e m .

Lema 4.17 [17, pág. 26] *Sejam ℓ e m índices de duas iterações como considerados no Lema 4.15. Se a função objetivo F satisfaz as Hipóteses H1 - H5 e se ξ é o número de tentativas de região de confiança nas iterações de índices no conjunto $U = \{\ell, \ell + 1, \dots, m\}$, então*

$$\xi > \frac{12}{5} \frac{\epsilon}{N\rho}.$$

Demonstração.

Observe que pela Desigualdade do Valor Médio, como $\|\nabla^2 F(x)\| \leq N$, para $x \in \mathbb{R}^n$ e $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \rho$, obtém-se

$$\|\nabla F(x^{k+1}) - \nabla F(x^k)\| \leq N\rho,$$

para todo $k \in \mathbb{N}$. Assim,

$$\|\nabla F(x^{m+1}) - \nabla F(x^\ell)\| \leq \sum_{i=1}^{m+1-\ell} \|\nabla F(x^{\ell+i}) - \nabla F(x^{\ell+i-1})\| \leq (m - \ell + 1)N\rho.$$

Desta maneira, com a desigualdade (4.53), tem-se

$$m - \ell + 1 > \frac{9\epsilon}{N\rho}. \quad (4.56)$$

Por outro lado, de acordo com o Algoritmo 2.1, a cada 3 iterações consecutivas é realizada pelo menos uma tentativa de região de confiança. Além disso, de acordo com os resultados obtidos na demonstração do lema anterior, tem-se que todas as tentativas de região de confiança entre ℓ e m inclusive são bem sucedidas. Deste modo, ξ representa não apenas o número de tentativas de região de confiança como também o de iterações de região de confiança entre ℓ e m inclusive. Assim,

$$\xi \geq \frac{(m - \ell - 1)}{3},$$

uma vez que os dois extremos não são necessariamente iterações de região de confiança. Desta forma, por (4.56) tem-se

$$\xi \geq \frac{m - \ell - 1}{3} = \left(1 - \frac{2}{m - \ell + 1}\right) \left(\frac{m - \ell + 1}{3}\right) > \left(1 - \frac{2}{m - \ell + 1}\right) \frac{3\epsilon}{N\rho}.$$

Além disso, por (4.54), obtém-se $-\frac{1}{m - \ell + 1} \geq -\frac{1}{10}$. Finalmente com a desigualdade anterior obtém-se

$$\xi > \left(1 - \frac{2}{10}\right) \frac{3\epsilon}{N\rho},$$

o que conclui a demonstração. □

Agora prova-se que a diferença entre o valor da função objetivo no início da iteração ℓ e no final da iteração m é limitada inferiormente.

Corolário 4.18 [17, (7.10)] *Sejam ℓ e m índices de duas iterações como considerados no Lema 4.15. Se as Hipóteses H1 - H5 são satisfeitas, então*

$$F(x^\ell) - F(x^{m+1}) \geq \frac{84}{475} \frac{\epsilon^2}{N}. \quad (4.57)$$

Demonstração.

Considere U' o subconjunto do conjunto de índices $U = \{\ell, \ell + 1, \dots, m\}$, de modo que U' seja constituído apenas dos índices de U que representam iterações de região de confiança.

Como $(F(x^k))_{k \in \mathbb{N}}$ decresce monotonicamente, devido a (2.5), tem-se que cada diferença da função objetivo entre dois pontos consecutivos da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ é não negativo. Desta forma,

$$F(x^\ell) - F(x^{m+1}) = \sum_{i=\ell}^m F(x^i) - F(x^{i+1}) \geq \sum_{i \in U'} F(x^i) - F(x^{i+1}).$$

Como o lado direito da desigualdade acima considera apenas as diferenças para os passos de região de confiança entre ℓ e m , tem-se que (4.49) é satisfeita. Assim,

$$F(x^\ell) - F(x^{m+1}) \geq \sum_{i \in U'} \frac{7}{95} \rho \epsilon.$$

Como a cardinalidade de U' é igual a ξ , conclui-se que

$$F(x^\ell) - F(x^{m+1}) \geq \left(\frac{7}{95} \rho \epsilon \right) \left(\frac{12}{5} \frac{\epsilon}{N \rho} \right)$$

e o resultado está demonstrado. □

Na seção anterior foi visto que se as Hipóteses H1 - H5 são satisfeitas, então existe pelo menos um ponto de acumulação da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$, gerada pelo Algoritmo 2.1 que é estacionário, ou seja, (4.42) é válida. Finalmente, mostra-se no próximo resultado que $\lim_{k \rightarrow \infty} \nabla F(x^k) = \vec{0}$, o qual garante que todo ponto de acumulação da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ é estacionário, ou seja, que o “lim inf” de (4.42) pode ser trocado por “lim” sem mais considerações. Em outras palavras, prova-se a convergência global do Algoritmo 2.1.

Teorema 4.19 [17, Teorema 1] *Se as Hipóteses H1 - H5 são satisfeitas, então*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \nabla F(x^k) = \vec{0}. \quad (4.58)$$

Demonstração.

Suponha por absurdo que (4.58) não seja satisfeito. Desta maneira, existe um $\epsilon > 0$ e um subconjunto infinito \mathbb{N}' do conjunto dos naturais tal que, para todo $k \in \mathbb{N}'$, tem-se

$$\|\nabla F(x^k)\| > 10\epsilon.$$

Denote por k_ϵ o índice da primeira iteração em que o raio da região de confiança satisfaça (4.46). Suponha sem perda de generalidade que, para todo $k \in \mathbb{N}'$, tem-se $k \geq k_\epsilon + 2$.

Considere ℓ_1 o primeiro elemento de \mathbb{N}' e m_1 o menor inteiro maior que ℓ_1 , tal que $\|\nabla F(x^{m_1+1})\| < \epsilon$. A existência de m_1 é assegurada pelo Corolário 4.12. Agora, são construídas recursivamente duas sequências $(\ell_i)_{i \in \mathbb{N}}$ e $(m_i)_{i \in \mathbb{N}}$ tais que $\ell_{i+1} \in \mathbb{N}'$ seja o menor inteiro maior que m_i e m_{i+1} seja o menor inteiro maior que ℓ_{i+1} tal que $\|\nabla F(x^{m_{i+1}+1})\| < \epsilon$, para $i \in \mathbb{N}$. Observe que essas duas sequências $(\ell_i)_{i \in \mathbb{N}}$ e $(m_i)_{i \in \mathbb{N}}$ satisfazem $\|\nabla F(x^{\ell_i})\| > 10\epsilon$ e $\|\nabla F(x^{m_{i+1}})\| < \epsilon$, respectivamente, para todo $i \in \mathbb{N}$.

Deste modo, para cada $i \in \mathbb{N}$ obtém-se um par $\{\ell_i, m_i\}$ para o qual o Corolário 4.18 é satisfeito. Logo, (4.57) é válida infinitas vezes. Por outro lado, a sequência $(F(x^k))_{k \in \mathbb{N}}$ é monótona não crescente e pela Hipótese H4, F é limitada inferiormente, donde segue que $F(x^{\ell_i}) - F(x^{m_i+1}) \rightarrow 0$, contradizendo (4.57). Desta maneira, a equação (4.58) é válida. Consequentemente, todo ponto de acumulação da sequência $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ é estacionário, o que prova a convergência global do Algoritmo 2.1.

□

Conclusão

Discutiu-se neste trabalho um método de região de confiança para minimização irrestrita que não faz uso de derivadas. Inicialmente, procurou-se conhecer o método de região de confiança clássico que utiliza as derivadas. Posteriormente, estudou-se a adaptação proposta por Powell em [17], que se refere a uma minimização irrestrita sem utilizar derivadas e também evita o excesso de avaliações da função objetivo. Como a abordagem discutida neste trabalho não utiliza derivadas, as funções objetivos são aproximadas por modelos quadráticos através de interpolações polinomiais.

O método estudado para minimização irrestrita sem derivadas possui três tipos de iterações, sendo essas alternativas *alpha*, alternativas *beta* e região de confiança. As iterações alternativas *alpha* e *beta* visam melhorar a disposição dos pontos interpoladores, de modo que estes permaneçam afim independentes. Já as iterações de região de confiança têm como objetivo minimizar o modelo dentro de uma certa região, na esperança de que uma parte dessa redução seja herdada pela função objetivo.

As iterações de região de confiança são baseadas em interpolação polinomial quadrática com liberdade total na determinação da Hessiana do modelo, desde que essas sejam simétricas e uniformemente limitadas. Cada conjunto interpolador é constituído de $n + 1$ pontos afins independentes. A cada iteração do método, no máximo um ponto do conjunto interpolador é alterado. Além disso, apenas um valor da função objetivo é calculado por iteração.

Devido à sua importância, parte significativa do trabalho foi dedicada à prova da convergência global do método. Para tal, foram obtidas várias propriedades do algoritmo e do conjunto interpolador. Em seguida, provou-se primeiramente que qualquer sequência gerada pelo algoritmo possui um ponto de acumulação que é estacionário. Por fim, demonstrou-se que todos os pontos de acumulação de qualquer sequência gerada pelo algoritmo são pontos estacionários.

Essencialmente neste trabalho procurou-se explicitar um algoritmo de região de confiança que satisfaz as exigências do método proposto por Powell em [17]. Como salientado pelo próprio Powell, esta versão do algoritmo é direcionada à prova de convergência. Para fins de implementação, provavelmente, seja necessário fazer certas adaptações, o que fica como proposta para trabalhos futuros.

Referências Bibliográficas

- [1] M. S. Bazaraa, H. D. Sherali e C. M. Shetty. *Nonlinear Programming Theory and Algorithms*. John Wiley, Nova York, 2ª edição, 1993.
- [2] I. Camargo e P. Boulos. *Geometria Analítica um tratamento vetorial*. Pearson Education do Brasil Ltda, São Paulo, Brasil, 2005.
- [3] A. R. Conn, N. I. M. Gould e P. L. Toint. *Trust-Region Methods*. MPS-SIAM Series on Optimization, SIAM, Filadelfia, 2000.
- [4] A. R. Conn, N. I. M. Gould e L. N. Vicente. Global Convergence of general derivative-free trust-region algorithms to first and second order critical points. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 20, págs. 387-415, 2009.
- [5] A. R. Conn, K. Scheinberg e P. L. Toint. On the convergence of derivative-free methods for unconstrained optimization. Em M.D. Buhmann and A. Iserles, editores, *Advances in Nonlinear Programming*, págs 83-108. Cambridge University Press, Inglaterra, 1997.
- [6] A. R. Conn, K. Scheinberg e L. N. Vicente. Geometry of sample sets in derivative free optimization. Part ii: polynomial regression and underdetermined interpolation. Relatório técnico, Universidade de Coimbra, Portugal, 2005.
- [7] A. R. Conn, K. Scheinberg e L. N. Vicente. *Introduction to Derivative-Free Optimization*. MPS-SIAM Series on Optimization, Filadelfia, 2009.
- [8] E. W. Karas e A. A. Ribeiro. Um curso de Otimização. Notas de aula, UFPR, Curitiba, Brasil, 2011.
- [9] S. J. Leon. *Álgebra Linear com Aplicações*. LTC, Brasil, 1998.
- [10] E. L. Lima. *Curso de Análise volume 2*. Instituto de Matemática Pura e Aplicada, Rio de Janeiro, Brasil, 1981.
- [11] E. L. Lima. *Análise no Espaço \mathbb{R}^n* . Instituto de Matemática Pura e Aplicada, Rio de Janeiro, Brasil, 2004.
- [12] D. G. Luenberger e Y. Ye. *Linear and Nonlinear Programming*. Springer, Nova York, 3ª edição, 2008.
- [13] J. Nocedal e S. J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, 1999.
- [14] M. J. D. Powell. UOBYQA: unconstrained optimization by quadratic approximation. *Math. Programming*, vol. 92, págs. 555-582, 2002.

- [15] M. J. D. Powell. The NEWUOA software for unconstrained optimization without derivatives. *Large-Scale Optimization*, editores G. Di Pillo e M. Roma, Springer Nova York, págs. 255-297, 2006.
- [16] M. J. D. Powell. The BOBYQA algorithm for bound constrained optimization without derivatives. Relatório técnico NA2009/06, Universidade de Cambridge, Inglaterra, 2009.
- [17] M. J. D. Powell. On the Convergence of Trust Region Algorithms for Unconstrained Minimization without Derivatives. Relatório técnico, Dep. of Applied Mathematics and Theoretical Physics, Inglaterra, 2011. Apresentado no Workshop on Nonlinear Optimization, Variational Inequalities and Equilibrium Problems, Érice, Itália, 2010.
- [18] R. T. Rockafellar. *Convex Analysis*. Princeton University Press, Nova Jersey, 1970.